



TITLE:

量子スピン系の高温展開による新しいモンテカルロ法の研究(
Dissertation_全文)

AUTHOR(S):

門脇, 眞示

CITATION:

門脇, 眞示. 量子スピン系の高温展開による新しいモンテカルロ法の研究. 京都大学, 1991, 工学博士

ISSUE DATE:

1991-03-23

URL:

<https://doi.org/10.11501/3053090>

RIGHT:

量子スピン系の高温展開による 新しいモンテカルロ法の研究

平成 2 年 10 月

門 脇 眞 示

量子スピン系の高温展開による 新しいモンテカルロ法の研究

平成 2 年10月

門 脇 眞 示

目 次

第 1 章 序論	1
1.1 高温級数展開法の概要	1
1.2 高温級数展開によるモンテカルロ法の概要	6
1.3 本研究の目的ならびに大要	9
第 2 章 高温級数展開としてのモーメント展開	12
2.1 序文	12
2.2 ハイゼンベルク模型のための高温展開	13
2.2.1 ハミルトニアン	13
2.2.2 分配関数とその高温展開係数	14
2.3 XY 模型のための高温展開	17
2.3.1 ハミルトニアン	17
2.3.2 分配関数とその高温展開係数	19
2.4 熱力学的諸量	28
第 3 章 展開係数のモンテカルロ評価	
—ハイゼンベルク模型の場合—	29
3.1 序文	29
3.2 置換のサイクル分解	30
3.2.1 置換の高速変換アルゴリズム	31
3.2.2 サイクル分解の例	33
3.2.3 トレースの評価	36

第 4 章 展開係数のモンテカルロ評価	
—XY 模型の場合—	43
4.1 序文	43
4.2 非零トレース値に寄与するクラスターの抽出 (手続き 1)	46
4.3 クラスタ中の非零トレース率の算定 (手続き 2)	48
4.4 トレースの評価 (手続き 3)	58
第 5 章 展開項の計算法	60
5.1 序文	60
5.2 展開係数の内挿法	61
5.2.1 ハイゼンベルク模型のための内挿法	61
5.2.2 XY 模型のための内挿法	62
5.3 展開項の計算	64
第 6 章 ハイゼンベルク模型への応用	66
6.1 一次元環状格子強磁性体への応用	66
6.2 二次元正方格子強磁性体への応用	80
6.2.1 本方法の有効性と正確性	80
6.2.2 熱力学的諸量	85
第 7 章 XY 模型への応用 — 一次元環状格子強磁性体の場合—	100
7.1 展開係数についての留意点	100
7.2 熱力学的諸量の評価	106
第 8 章 まとめ と 今後の指針	116
謝 辞	120
参 考 文 献	121
付 録 プログラム・リスト	124

第 1 章 序論

1.1 高温級数展開法の概要

統計力学と熱力学を結ぶ重要な関数である分配関数の温度の逆ベキによる級数展開を用いた高温級数展開法は、1936 年に Kramers [1] によって初めて用いられた方法である。この方法は翌年、Opechowski [2] によってスピン $1/2$ 量子ハイゼンベルク強磁性スピン系に対してはじめて適用された。その後、彼の結果には一部誤りがあることが、Zehler [3] によって発見されて、正された。この方法は Brown 達 [4] によって一般のスピン S への応用がなされ、更に Rushbrooke と Wood [5] によってより高次の項まで求められ、Brown 達の第 5 項の結果の誤りが訂正され、方法としてもより系統的なやり方に修正された。また、彼らとは独立に Domb と Sykes 達 [6] もスピン $1/2$ の系を取り扱った。ハイゼンベルク模型に対する高温級数展開法には次の 3 つのアプローチがある [7]。つまり、モーメント法、キミュラント法および有限クラスター法である。モーメント法はいま紹介した Kramers や Opechowski 達によって初めて用いられ、後に Rushbrooke と Wood [5] によって修正されたものである。キミュラント法はスピン $1/2$ イジング模型に対して Brout [8] によって最初に導入され、後で Rushbrooke [9] によって非可換演算子に対しても適用できるように修正された。有限クラスター法は Domb [10] によってキミュラント法のすぐ後を追うようにして公表された。これらの方法についての総合報告が文献 7 および 10 において詳しく解説されて

いるが、ここでは Rushbrooke と Wood によるモーメント法 [5,7] について概要を述べることにする。

任意のスピン S に対して一般化されたハイゼンベルグ模型のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -2J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - gH \sum_i S_i^z \quad (1.1.1)$$

で与えられる。ただし、 \mathbf{S} はスピン演算子、 J は結合定数、 $\sum_{\langle i,j \rangle}$ は最近接サイト i および j についての和を表す。モーメント展開はベキ級数としての指数関数 $\exp(-\beta\mathcal{H})$ を β で形式的に展開するものである。つまり、

$$\exp(-\beta\mathcal{H}) = 1 - \beta\mathcal{H} + (1/2!)(\beta\mathcal{H})^2 - + \dots \quad (1.1.2)$$

である。ただし、 $\beta = 1/k_B T$ 、 k_B は Boltzmann 定数である。分配関数 Z は

$$Z = \text{Tr}\{\exp(-\beta\mathcal{H})\} \quad (1.1.3)$$

で与えられる。(1.1.2) 式を (1.1.3) 式に代入すれば、

$$Z = \text{Tr}(\mathbf{I}) [1 - \beta \langle \mathcal{H} \rangle + (1/2!)\beta^2 \langle \mathcal{H}^2 \rangle - + \dots] \quad (1.1.4)$$

を得る。ただし、 $\langle \mathcal{H}^n \rangle$ は規格化されたトレース

$$\langle \mathcal{H}^n \rangle = \text{Tr}\{\mathcal{H}^n\} / \text{Tr}(\mathbf{I}) \quad (1.1.5)$$

を表す。ここに、 $\text{Tr}(\mathbf{I})$ はその系における状態の総数である。スピン S に対しては $\text{Tr}(\mathbf{I}) = (2S+1)^N$ となる。ただし、 N は格子サイトの個数である。(1.1.4) 式の β のベキ係数はハミルトニアンに対するモーメント $b_n = \langle \mathcal{H}^n \rangle$ に比例している。ところで分配関数 Z の対数は、(1.1.4) 式により

$$\ln Z = \ln \text{Tr}(\mathbf{I}) + \ln [1 - \beta \langle \mathcal{H} \rangle + (1/2!)\beta^2 \langle \mathcal{H}^2 \rangle - + \dots] \quad (1.1.6)$$

で与えられる。これを

$$\ln Z = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n}{n!} \beta^n \quad (1.1.7)$$

とおく。ここに c_n はキュムラントと呼ばれている展開係数である。(1.1.6) 式の右辺の第 2 項に $\ln(1+X) = X - \frac{1}{2}X^2 + \frac{1}{3}X^3 - + \dots$ なる級数展開を用い、 β のべきで整理し、(1.1.7) 式の右辺と比較すると、モーメント b_n を用いてキュムラント c_n を次のように表すことができる。

$$\begin{aligned} c_1 &= b_1 \\ c_2 &= b_2 - b_1^2 \\ c_3 &= b_3 - 3b_1b_2 + 2b_1^3 \\ c_4 &= b_4 - 4b_3b_1 - 3b_2^2 + 12b_2b_1^2 - 6b_1^4 \\ &\vdots \end{aligned} \quad (1.1.8)$$

各 $b_n (\equiv \langle \mathcal{H}^n \rangle)$ は N に比例する項の外に N^2, N^3, \dots, N^n に比例する項を持っているが、 c_n は自由エネルギー $F = -k_B T \ln Z$ と結びついているので、その示量性により N に比例する項しか含まない。実際に (1.1.8) 式の右辺を求めてみると N^2 以上の項は相殺して、 N に比例する項しか残らないことが分かる。したがって、各 b_n から N に比例する部分のみを拾い出せばよい。ハミルトニアン (1.1.1) において零磁場の場合のみを考えることにする。 $P = \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ とおいて、

$$b_n = (-2J)^n \langle P^n \rangle, \quad \langle P^n \rangle = (2S+1)^{-N} \text{Tr}\{P^n\} \quad (1.1.9)$$

を計算する。スピン演算子の積 P^n における任意の項は格子上のサイトの最近接対を結ぶ n 本の線の集合によって表されることができる。したがって $\langle P^n \rangle$ を評価するには次の 3 つの手続きを行うことが必要である [11]。

- (a) n 本の線からなるすべての取り得るダイアグラムを数え上げること。
- (b) 各ダイアグラムに対応するスピン変数 S の積のトレースを計算すること。
- (c) 各ダイアグラムが N 個の相異なるサイトをもつ格子上で生起できる回数を算定すること。

この中手続き (b) が最も面倒である。以上のような手順によって (1.1.6) 式を評価すれば、任意の熱力学的諸量の n 個の項についての情報が得られる。高温展開の利点は、転移温度や critical exponents などのかなり正確な値が得られることである [7,12-14]。転移温度を推定するために、Opechowski は $1/\chi(0)$ が 0 となる値を求めた。この方法は収束性が悪いので余り有効でない。次に ratio method が用いられるようになった。この方法は係数が滑らかな振る舞いをするときのみ有効である。係数が不規則に変わるような場合にも有効な手段として、Padé 近似を用いる方法が Baker [15] によって導入された。ハイゼンベルク模型における高温展開法では、多いもので初めの 20 数項までの展開係数の厳密値が評価されていて、高温領域においては厳密値に匹敵する結果を得ているといえる。この展開係数の厳密値を得るには一項上げる毎にそれまでに行ってきた労力より更に多くのものを要求される [16]。このように、たゆまない努力の結果得られた展開係数ではあるが、低温での熱力学的諸量を調べるには項数が足りないために不十分であるようである。

一方、スピン 1/2 量子 XY 強磁性スピン系に対する高温展開法は、Betts 達 [17] によって初めて用いられ、f.c.c. および b.c.c. 格子に対して比熱級数の展開係数を 11 項、f.c.c., b.c.c および s.c. 格子に対して長距離秩序におけるゆらぎに対する級数の展開係数を 9 項計算し、転移温度と critical exponents が評価された。

Betts 達による方法 [17,18] の概略を述べよう。分配関数の級数展開の第 n

項は n 本の矢印（以後 arrow と記す）の集合によって図式的に表せる格子サイトの n 個の有向最近接対の選択に対応している。これらの arrow は arrow の出現順序に従う順序付き有向線形グラフを形成する。一般に、いくつかの順序付き有向線形グラフにおいてその順序を無視すると同一の有向グラフとなるものがある、そのグラフを shadow グラフという。また、いくつかの shadow グラフにおいて最近接サイト対毎に arrow を一つに束ねる（ボンドとなる）と同一の無向グラフとなるものがある、そのグラフを bare グラフという。演算子の交換関係のため、分配関数に非零の寄与をするものは次の 2 条件を満たす順序付きグラフだけである。(a) bare グラフの各頂点（サイト）においては arrow の head と tail の数が同数であること。(b) 各サイトにおいて出矢や入矢毎に arrow の head と tail が交互になること。ただし、arrow のやじりの付いてる方を head、反対側を tail とした。このようなグラフの Z への寄与は 2^{N-s} である。ただし、 s は bare グラフの頂点の数である。結局、分配関数は

$$Z_N^{\mathcal{L}}(T) = \sum_{l=0}^{qN/2} \frac{K^l}{l!} \sum_{s=2}^l 2^{N-s} \sum_i \mathcal{N}(g_{s,i}, \mathcal{L}) \sum_j h(g_{s,i}^{(j)}) v(g_{s,i}^{(j)})$$

で与えられる[17]。ただし、 q は格子の配位数であり、 $K = J/k_B T$ である。 $g_{s,i}$ は s 個の頂点をもつ第 i 番目の bare グラフであり、 $g_{s,i}^{(j)}$ は $g_{s,i}$ に対応した第 j 番目の等価でない shadow グラフである。 $\mathcal{N}(g_{s,i}, \mathcal{L})$ は N 個のサイトによる格子 \mathcal{L} 内での bare グラフ $g_{s,i}$ と同形な部分グラフの数（格子定数）である。 $h(g_{s,i}^{(j)})$ は与えられた shadow グラフ $g_{s,i}^{(j)}$ に等価な shadow グラフの数 (horizontal weight) である。 $v(g_{s,i}^{(j)})$ は与えられた shadow グラフ $g_{s,i}^{(j)}$ に対応して、条件 (b) を満たす順序付き有向グラフの数 (vertical weight) である。この vertical weight の評価が一番面倒である。この外、高温展開法は、イジング模型等に対しても多くの応用がなされている。このように各種模型において、一般のスピン S に対し、

また各種格子に対して取り扱われた [19]。

1.2 高温級数展開によるモンテカルロ法の概要

一方、スピン 1/2 量子ハイゼンベルク強磁性系に対するモンテカルロ法は、1962年に、Handscomb [20] によって、初めて提案された。この方法は上で述べた高温展開法にその基礎を置いている。この方法は、スピン 1/2 の時に有効な Dirac 恒等式により、置換演算子をうまく利用しており、古典系に変換せず、そのまま量子系として扱ったものとしては最初のものである。しかしながらこの方法はその後20年近く忘れ去られていたが、Lyklema [21] によって、サンプリングの手法に改良を加えられ実用的なものとなった。そのアプローチ [21,22] の概略は次の通りである。

系のハミルトニアンは (1.1.1) 式で与えられる。ここではハミルトニアンが置換演算子を用いて表すことができる $S = 1/2$ の場合に限ることとする。その詳細については第2章 第 2.2.1 項を参照下さい。いま、ボンド番号 b のボンドによって結ばれている最近接サイト i_b および j_b におけるスピン状態を入れ換える演算子を $E_b \equiv (i_b j_b)$ で表す (演算子 $(i_b j_b)$ は通常互換と呼ばれている)。この時、分配関数は

$$Z = \text{Tr}\{\exp(-\mathcal{H}/k_B T)\} = \sum_{\tau=0}^{\infty} \frac{\tau^{-\tau}}{\tau!} \sum_{C_\tau} \text{Tr}\{E_{b_1} \cdots E_{b_\tau} \exp(-\mathcal{H}_0/k_B T)\} \quad (1.2.1)$$

ただし、 \sum_{C_τ} はすべての取り得る列 (b_1, \dots, b_τ) についての和を示し、 $\tau = k_B T/J$ 、 \mathcal{H}_0 は (1.1.1) 式の第2項である。

$$\pi(C_n) = \frac{\tau^{-\tau}}{\tau!} \text{Tr}\{E_{b_1} \cdots E_{b_\tau} \exp(-\mathcal{H}_0/k_B T)\} \quad (1.2.2)$$

と定義すれば、 $Z = \sum_r \sum_{C_r} \pi(C_r)$ となる。演算子 O の期待値は

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}\{O \exp(-\mathcal{H}/k_B T)\} = \frac{\sum_r \sum_{C_r} \Omega(C_r) \pi(C_r)}{\sum_r \sum_{C_r} \pi(C_r)} \equiv \bar{\Omega} \quad (1.2.3)$$

で与えられる。ただし、

$$\Omega(C_r) = \frac{\text{Tr}\{O E_{b_1} \cdots E_{b_r} \exp(-\mathcal{H}_0/k_B T)\}}{\text{Tr}\{E_{b_1} \cdots E_{b_r} \exp(-\mathcal{H}_0/k_B T)\}} \quad (1.2.4)$$

と定義する。 $\bar{\Omega}$ は分布 $\pi(C_r)$ についての古典的な期待値を示す。この期待値を評価するには、すべての取り得る列 C_r に対する演算子 $E_{b_1} \cdots E_{b_r}$ によって張られる空間における Markov 連鎖を実現化するモンテカルロ法を構築しなければならない。その手続きの概略は次の通りである。

(a) 列に一つの演算子を追加 (F) するかまたは削除 (B) することを無作為に決定する。

(b) その列内の無作為に選ばれた箇所に、(a) の決定に従って (F) のときには無作為に新しい演算子 E_{b_i} を一つ選びその箇所に挿入し、(B) のときにはその箇所を削除する準備を整える。

(c) 受容率を計算し、現在のステップを受容するか拒絶するかを決定する。拒絶に決定したときは (b) を具体的に実行する。

Lyklema はこの過程のための推移確率を次のように定めた。

$$P(C_r \rightarrow C_{r+1}) = p(i)f(r)T(C_{r+1}), \quad P(C_{r+1} \rightarrow C_r) = [1 - f(r+1)]T(C_r) \quad (1.2.5)$$

ここに、 $f(r)$ は長さ r の列に一つの置換を追加する確率であり、 $p(i)$ は置換 i を選ぶ確率である。受容率を

$$T(C_{r+1}) = \min \left(1, \frac{1 - f(r+1)}{p(i)f(r)} \frac{\pi(C_{r+1})}{\pi(C_r)} \right) \quad (1.2.6)$$

に選べばこの Markov 連鎖の定常分布が存在する [23]。推移確率の定め方には任意性があり、まだ探求する余地は残されている。彼は $T = 0$ 近傍の一次元量子ハイゼンベルク強磁性体の研究を行った [24]。反強磁性体にも適用を試みたが、高温級数展開が交代級数となり、分布関数がかならずしも正とはならないのでうまくいかなかった [22]。次に、Chakravarty と Stein [25] は XY 模型に対する Betts 達 [17] の手法を基にして、演算子 $h_{ij} = \sigma_i^+ \sigma_j^- + \sigma_i^- \sigma_j^+$ がスピン状態に作用するとき、サイト i とサイト j のスピン状態が同じであれば零を与え、異なるときはお互いのスピン状態を入れ換える効果を持つことを生かした。モンテカルロ法としては、Handscomb の方法に準じたものであるが、偶数個の演算子によってのみ閉じたループをつくるような格子系でのサンプリングに際しては演算子列から無作為に選ばれた 2 箇所に対して同時に挿入または削除を行えばよい。この方法を一、二 および 三次元スピン 1/2 強磁性ハイゼンベルク模型と一次元 XY 模型に適用されよい結果を得た。これにより、異方的な模型にまでその適用が広げられ、更に一般化された。続いて、Lee 達 [26] により、Chakravarty 達の方法を基にして、スピン演算子の性質をうまく生かした変換をし、エネルギーの原点もシフトしたハミルトニアン $\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} (h_{ij}^2 - h_{ij})$ を用いて、分配関数のモーメント展開における負符号問題のかなりの部分を解消した。彼らは、その方法を用いて一および二次元スピン 1/2 量子ハイゼンベルク反強磁性系の研究を行った。特に、(nonfrustrated) 正方格子および (frustrated) 三角格子に対する熱力学的諸量が計算され、低温での系の格子依存性が定性的に調べられた。Lee 達の方法は、Manousakis と Salvador [27] により、同じく正方格子に適用されて、温度が下がるのにつれて反強磁性的秩序に関する相関距離が急成長することが示された。

以上のように、高温展開法に基づくモンテカルロ法は量子スピン系を研究

する際の強力な手段であることが分かってきた。しかしながら、Handscomb の方法は、Metropolis 達[28] によって最初に開発された（分配関数を直接評価することを回避する）技法を用いているので、シミュレートしたい特定の温度毎の物理量しか得られない。転移点近傍の振る舞いを調べる際、沢山のサンプル点が必要となるが、そのためには法外な計算量が必要となる。われわれは Metropolis 達の技法とは逆に、むしろ正面から分配関数を直接評価する方法 [29] を提案した。恐らく本方法は、モンテカルロ法において分配関数を直接評価した最初の方法だと思う。分配関数が直接評価できるということで、この近似により可能な範囲において任意の温度における熱力学的諸量について調べることが可能となった。その詳細を本論文で述べたい。

1.3 本研究の目的ならびに大要

前節で述べた通り、われわれは高温展開法に基づき分配関数を直接評価できる全く新しいタイプのモンテカルロ法を提案し、これを用いて極めて良好な結果を得た[29,30, 31]。本論文では、この方法の理論的な面とそれを実現するために用いた有効なアルゴリズムについて詳しく述べるとともに、この方法を適用する上での技術的な面についても詳しく述べたい。

次章では、本方法と高温展開法との関わりについて述べるとともに、後の章でしばしば参照される数理上の公式をまとめておくことにする。ハイゼンベルク模型とXY模型とでは、その基となる理論的背景が異なるため、別々に扱った方が理解し易いのでそのようにする。まず、第1節の序文に続き、第2節では、ハイゼンベルク模型に関する事項を解説する。この節の内容は第3章のトレースの評価法の理論的側面を支えるものである。第3節では、XY模型に関する事項

を解説する。この節の内容は第4章のトレースの評価法の理論的側面を支えるものである。前節の内容より少し複雑であるので例を引きながら解説していくことにする。特にスピン演算子を `arrow` によって図式的に取り扱う際の両者の対応付けを分かりやすく解説することにする。第4節では、両模型の熱力学的諸量を評価するために必要な公式をまとめて与える。本方法では分配関数を直接評価できるのでその温度微分をとることによって得られる熱力学関数は容易に導き出せる。

第3章では、ハイゼンベルク模型のための展開係数のモンテカルロ評価法について詳しく述べる。まず第1節では、高次の展開項を厳密に評価することは困難であるので、モンテカルロ法を用いて展開係数を近似的に評価するためのサンプリングの手順について述べる。第2節では、展開係数の評価に必要なトレースを求める際に、置換演算子を独立したサイクルに分解する必要がある。そのための有効な方法が与えられる。

第4章では、XY模型のための展開係数のモンテカルロ評価法について詳しく述べる。スピン $1/2$ XY模型に対する高温展開法は、すでに紹介したように Betts 達によって考案された。その方法は Chakravarty 達により、モンテカルロ法にも生かされた。本方法にも Betts 達の表示法を生かすことができる。現在のところ一次元系に対してではあるがこの模型に適用できることが分かった [32]。ここでは、そのアルゴリズムを解説する。第1節においては、その評価法を実現するための手続きを内容に応じて3つに分けて述べることにする。第2節では、最初の手続きとして、非零トレース値に寄与するクラスターの抽出法について扱う。内容としては、ボンドの配置によってつくられるグラフを独立したクラスターに分解すること、そして、そのグラフにおけるボンドの配置上の重複度について述べる。第3節では、任意の一つの独立したクラスターの非零トレース

率の算定法について述べる。特に、同一の最近接サイト間にある複数個の同種の arrow に関する重複度について、例を引いて詳述する。最後に、第4節では、独立したクラスター毎に評価した部分トレースを用いて元の項全体のトレース値を得るための計算法について述べる。

第5章では、10 個足らずの内挿用の展開係数から数 10 万個にもわたる残りの展開係数を得ることができる強力な内挿法について述べる。

第6章では、ハイゼンベルク模型への応用例として一次元系と二次元系について示す。まずスピン・サイズ $N = 10$ の一次元スピン $1/2$ ハイゼンベルク強磁性系に適用して、有限系の数値計算としては厳密である Bonner と Fisher [33] の結果と比較してその精度をテストする。更に、同じ系で、スピンサイズ $N = 20, 30$ および 128 に対して熱力学的諸量を評価して、高温展開法で Padé 近似を用いた Baker 達の結果[34]と比較する。続いて、スピンサイズ $N = 10 \times 10, 20 \times 20$ および 30×30 の二次元正方格子における同じ系に対する熱力学的諸量を評価して、高温側で Baker 達の結果 [35] と、低温側でスピン波理論に基づいた Takahashi [36] の結果と比較する。

第7章では、XY 模型への応用例として一次元環状格子系について示す。ここではスピンサイズ $N = 32$ および 128 の一次元スピン $1/2$ XY 強磁性系に適用した結果を Katsura [37] の厳密解と比較して本方法がXY模型にも有効であることを示す。

最後に、第8章では、まとめと将来の指針を示す。

第2章 高温級数展開としてのモーメント展開

2.1 序文

前章でも紹介した通り、高温展開法は、スピン $1/2$ ハイゼンベルク強磁性模型に対して、Opechowski [2] よってはじめて用いられ、更に、Rushbrooke と Wood [5] によって一般のスピン S に対しても適用できるように修正された。この方法は別名モーメント法と呼ばれている。分配関数を温度の逆ベキで展開したときの係数（モーメント）と、自由エネルギーを温度の逆ベキで展開したときの係数（キュムラント）との間には、統計学でよく知られている関係（文献 7 の (2.6) 式を参照）が成り立つ。モーメントには $N, N^2 \dots$ に比例する項が含まれているが、キュムラントには、自由エネルギーが示量変数であるので、 N に比例する項のみが含まれている。したがって、両者の関係上、モーメントも、 N に比例する項だけを評価すればよい。（文献 7 の (2.7) 式を参照）この方法を用いて、多いものでも初めの 20 数項までの展開係数の厳密値が評価されていて、高温領域においては厳密値に匹敵する結果を得ているといえる。しかし、低温での熱力学的諸量を調べるには項数の不足のために不十分であるようだ。この欠点を補うため、われわれは新しい簡単なモンテカルロ法を提案した。本方法は展開係数をモンテカルロ法によって評価しているため十分正確な値が得られないので、モーメント・キュムラント変換（文献 7 の (2.6) 式参照）で数値的に桁落ちが生じてしまう。したがってモーメントの中 N に比例する項のみを拾い出せば

よいという利点は生かせなくて、 $N, N^2 \dots$ に比例する項を含むあらゆるモーメントを考慮する必要があり、扱えるのも有限スピン・サイズ N に限られている。それにもかからわず本方法は、第6章で述べる通り、かなり低温域においても熱力学的諸量にはかなり正確な値を与えてくれる。

一方、スピン $1/2$ XY 模型に対する高温展開法は Betts 達 [17] によって行われた。この方法の定式化は Betts [18] によって詳説されている。われわれの方法も現在のところ一次元系に対してではあるがこのモデルに適用できることが分かった[32]。更に、二次元の系に対しては、目下開発中である。

本章では、高温展開法としての、本方法のためのモーメント展開を述べることにする。次節において、スピン $1/2$ ハイゼンベルク模型ための高温展開法についての述べる。また、本論文中で必要とされる数理的な公式も合わせて与える。第2.3節では、スピン $1/2$ XY 模型のための高温展開法について述べる。その際、Betts 達の導入した、arrow によるグラフ表示について解説し、トレースを評価するのに必要な公式等を与える。第2.4節では、熱力学的諸量を評価するための公式をまとめておく。

2.2 ハイゼンベルク模型のための高温展開法

2.2.1 ハミルトニアン

スピン $1/2$ 等方的ハイゼンベルク模型の N スピン系を考える。ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j - \mu H \sum_{i=1}^N \sigma_i^z. \quad (2.2.1)$$

で与えられる。ただし、 $\vec{\sigma}(=2\mathbf{S})$ はパウリのスピン演算子、 $J(>0)$ は結合定数、 μ は磁気モーメント、そして H は z 方向に印加された外部磁場である。第1項

の和は最近接スピン対 i, j についてとる。周期境界条件を仮定する。よく知られている Dirac 恒等式 [38] $\vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j = 2(ij) - 1$ (ここに、 (ij) は互換と呼ばれている、サイト i および j におけるスピン状態を入れ換える演算子である。) を用い、またエネルギーの原点も $-(1/2)JN_b$ だけ移動すれば、ハミルトニアン (2.2.1) は

$$\mathcal{H} = -J \sum_{b=1}^{N_b} (i_b j_b) + \mathcal{H}_0, \quad (2.2.2)$$

のように書き直せる。ここに、 $(i_b j_b)$ の添え字 b はサイト i_b および j_b を結ぶボンドの番号であり、そして和 \sum_b は最近接ボンドの総数 N_b についてとる。 \mathcal{H}_0 は (2.2.1) 式の第 2 項を表す。

2.2.2 分配関数とその高温展開係数

分配関数は

$$Z = \text{Tr}\{\exp(-\mathcal{H}/k_B T)\} = \sum_{\tau=0}^{\infty} \frac{a_{\tau}}{\tau!} \tau^{-\tau}, \quad (2.2.3)$$

のように展開されることができる。ただし、 k_B は Boltzmann 定数、 T は温度、そして τ は $k_B T/J$ を表す。展開係数 a_{τ} は

$$a_{\tau} = \sum_{C_{\tau}} A(C_{\tau}) = \sum_{C_{\tau}} \text{Tr}\{\mathcal{P}(C_{\tau}) \exp(-\mathcal{H}_0/k_B T)\} \quad (2.2.4)$$

で与えられる。そして、 $\mathcal{P}(C_{\tau})$ は

$$\mathcal{P}(C_{\tau}) = (i_{b_1} j_{b_1})(i_{b_2} j_{b_2}) \cdots (i_{b_{\tau}} j_{b_{\tau}})(e_1) \cdots (e_s), \quad (2.2.5)$$

のように書くことができる。ただし、 (e) はサイト e のスピン状態を自身に写す恒等演算子であり、以後は省略する。 C_{τ} は集合 $\{1, 2, \dots, N_b\}$ から復元抽出により選ばれた τ 個のボンド番号 $b_1, b_2, \dots, b_{\tau}$ の任意の列を表し、 N_b^{τ} 個のすべて

のとりうる列 C_r についてとる。また、任意のボンド番号 b_k は最近接対 i_{b_k} および j_{b_k} と一意的に対応している。ただし、サイト番号 i_{b_k} は 1 から N までの整数である。そして、互換の積として表される $\mathcal{P}(C_r)$ は 1 から N までの全部で N 個の整数を含んでいるので、位数 N の置換となる。置換群の理論 [39] に従えば、置換はつぎのような共通要素を一つも持たない独立したサイクルの積に分解することができる。

$$\mathcal{P}(C_r) = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & N \\ k_1 & k_2 & k_3 & \cdots & k_N \end{pmatrix} = (j_1 j_2 \cdots j_{l_1})(j_{l_1+1} \cdots j_{l_1+l_2}) \cdots (\cdots j_N) \quad (2.2.6)$$

ここに、たとえば、サイクル $(j_1 j_2 \cdots j_{l_1})$ は、 $j_1 \rightarrow j_2, j_2 \rightarrow j_3, \cdots, j_{l_1} \rightarrow j_1$ のように写像する、長さ l_1 の巡回置換を表す。サイクルは決して共通した要素を持たないから、それらは、互いに交換可能である。したがって、 $A(C_r)$ は次のような形の部分トレースの積として評価できる。

$$\text{Tr} \left\{ (j_{n_1} j_{n_2} \cdots j_{n_l}) \exp \left((\mu H / k_B T) \sum_{i=1}^l \sigma_{j_{n_i}}^z \right) \right\} \quad (2.2.7)$$

ただし、 $\{\cdots\}$ は $2^l \times 2^l$ 行列である。演算子 $(j_{n_1} j_{n_2} \cdots j_{n_l})$ は相異なる l 個のサイト $j_{n_1}, j_{n_2}, \cdots, j_{n_l}$ 間で、スピン状態を巡回的に入れ換えるので、トレースに寄与するのは、状態 $|\alpha_{n_1} \alpha_{n_2} \cdots \alpha_{n_l}\rangle$ および状態 $|\beta_{n_1} \beta_{n_2} \cdots \beta_{n_l}\rangle$ のみである [22]。ただし、 α_{n_j} および β_{n_j} はそれぞれサイト n_j における上向きスピンと下向きスピンの状態を表す。したがって、長さ l のサイクルの部分トレースは

$$\exp(l\mu H / k_B T) + \exp(-l\mu H / k_B T) = 2 \cosh(l\mu H / k_B T) \quad (2.2.8)$$

で与えられる。演算子 $\mathcal{P}(C_r)$ が ν_1 個の長さ 1 のサイクル、 ν_2 個の長さ 2 のサイクル、等々で表されるとき、(2.2.4) 式中のトレースは

$$A(C_r) = \prod_{l=1}^N \{2 \cosh(lL)\}^{\nu_l}, \quad (2.2.9)$$

で与えられる。ただし、 L は $\mu H/k_B T$ を表し、そして ν_l は長さ l の独立したサイクルの個数である。 ν は次式を満たさなければならない。

$$1\nu_1 + 2\nu_2 + \cdots + l\nu_l + \cdots + N\nu_N = N. \quad (2.2.10)$$

零磁場に対しては、(2.2.9) 式は

$$A(C_r) = 2^{k(C_r)}, \quad (2.2.11)$$

に帰着される。ただし、 $k(C_r) = \sum_{l=1}^N \nu_l$ は独立したサイクルの総数である。

熱力学的諸量を評価するための $Z, \partial Z/\partial L$ および $\partial^2 Z/\partial L^2$ の展開係数は次のようにまとめられる。

$$Z = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{a_r}{r!} \tau^{-r}, \quad (2.2.12)$$

に対しては、

$$a_r = \sum_{C_r} A(C_r), \quad A(C_r) = \prod_{l=1}^N \{2 \cosh(lL)\}^{\nu_l}. \quad (2.2.13)$$

$$\frac{\partial Z}{\partial L} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{b_r}{r!} \tau^{-r}, \quad (2.2.14)$$

に対しては、

$$b_r = \sum_{C_r} B(C_r), \quad B(C_r) = A(C_r) \sum_{l=1}^N l \nu_l \tanh(lL). \quad (2.2.15)$$

そして、

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial L^2} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{d_r}{r!} \tau^{-r}, \quad (2.2.16)$$

に対しては、

$$d_r = \sum_{C_r} D(C_r),$$

$$D(C_r) = A(C_r) \left[\sum_{l=1}^N \nu_l l^2 - \sum_{l=1}^N (l \tanh(lL))^2 + \left\{ \sum_{l=1}^N l \nu_l \tanh(lL) \right\}^2 \right] \quad (2.2.17)$$

である。零磁場の場合は、(2.2.17) 式は

$$D(C_r) = A(C_r) \sum_{l=1}^N \nu_l l^2. \quad (2.2.18)$$

に帰着される。ただし、 ν は (2.2.10) を満たさなければならない。

2.3 XY 模型のための高温展開

2.3.1 ハミルトニアン

スピン 1/2 XY 模型に対するハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -4J \sum_{\langle ij \rangle}^N (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) - \mu H \sum_{i=1}^N S_i^z \quad (2.3.1)$$

で与えられる。ただし、 $S_j^\alpha (\alpha = x, y, z)$ はサイト j におけるスピン演算子 S の α 成分であり、 $J(>0)$ は結合定数であり、 N はサイト数であり、 μ は磁気モーメントであり、そして H は z 方向に印加された外部磁場である。第一項における和は最近接スピン対 i, j についてとる。また、周期境界条件を仮定する。

$$S^+ = S^x + iS^y, \quad S^- = S^x - iS^y \quad (2.3.2)$$

で定義された演算子 S_i^+ および S_i^- を用いれば、ハミルトニアン (2.3.1) は

$$\mathcal{H} = -2J \sum_{b=1}^{N_b} h_b - \mathcal{H}_0 \quad (2.3.3)$$

のように書き直せる。ここに、演算子 h_b を

$$h_b \equiv S_{i_b}^+ S_{j_b}^- + S_{i_b}^- S_{j_b}^+ \quad (2.3.4)$$

と定義した。ただし、 h における添え字 b はサイト i_b とサイト j_b とを結ぶボンドの番号であり、総和 \sum_b は最近接ボンドの総数 N_b についてとる。また、 \mathcal{H}_0 は (2.3.1) 式の第 2 項である。

行列表示では、スピン演算子 $\mathbf{S} = (S^x, S^y, S^z)$ は

$$S^x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S^y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.3.5)$$

で与えられる。(2.3.5) 式から容易に分かる通り S^z の固有値は $\pm \frac{1}{2}$ であり、その規格化された固有関数は

$$|+\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.3.6)$$

で与えられる。ただし、 $|+\rangle$ は上向きスピン ($S^z = \frac{1}{2}$) の状態を表し、 $|-\rangle$ は下向きスピン ($S^z = -\frac{1}{2}$) の状態を表す。ここでは、 S^x, S^y よりも S^+, S^- を用いた方が議論しやすく、便利である。(2.3.2) 式の右辺に (2.3.4) 式の行列を代入すれば、演算子 S^+ および S^- は

$$S^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.3.7)$$

のように書ける。(2.3.6) および (2.3.7) 式から、

$$S^+|+\rangle = 0, \quad S^+|-\rangle = |+\rangle, \quad S^-|+\rangle = |-\rangle, \quad S^-|-\rangle = 0 \quad (2.3.8)$$

なる関係を得る。今、2 個のスピンをもつ系を考えよう。その状態の基底として、 $|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle$ をとることとする。たとえば、 $|+-\rangle$ は、第一サイトにおけるスピン状態が上向きで、第二サイトにおけるスピン状態が下向きである状態を表す。この四つの状態ベクトルに h_b を作用させ、(2.3.8) を用いれば、

$$h_b|+-\rangle = |-+\rangle, \quad h_b|-+\rangle = |+-\rangle \quad \text{および} \quad \text{その他の時} \quad 0 \quad (2.3.9)$$

を得る。これから、 h_b に対する行列表示

$$h_b \equiv S_{i_b}^+ S_{j_b}^- + S_{i_b}^- S_{j_b}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.3.10)$$

を得る。つまり、 h_b は物理的には次のような演算子である。 h_b が互に反対向きスピン状態のスピン対に作用するときにはそれらのスピン状態を入れ替え、同じスピン状態のスピン対に作用するときには零を与える働きをする[17,18,25,26]。

2.3.2 分配関数とその高温展開係数

分配関数は

$$Z = \text{Tr} \{ \exp(-\mathcal{H}/k_B T) \} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{a_r}{r!} \tau^{-r} \quad (2.3.11)$$

のように展開できる。ただし、 k_B は Boltzmann 定数、 T は温度 そして τ は $k_B T/J$ を表す。展開係数 a_r は

$$a_r = \sum_{C_r} A(C_r) = \sum_{C_r} \text{Tr} \{ Q(C_r) \exp(-\mathcal{H}_0/k_B T) \} \quad (2.3.12)$$

で表される。ここに、 $Q(C_r)$ は

$$Q(C_r) = h_{b_1} h_{b_2} \cdots h_{b_r} \quad (2.3.13)$$

として定義する。また、 C_r は集合 $\{1, 2, \dots, N_b\}$ から復元抽出により選ばれた r 個のボンド番号 b_1, b_2, \dots, b_r の任意の列を表し、和はすべての取り得る N_b^r 個の列 C_r についてとる。 $Q(C_r)$ は具体的にはつぎのように書くことができる。

$$Q(C_r) = \prod_{k=1}^r (S_{i_{b_k}}^+ S_{j_{b_k}}^- + S_{i_{b_k}}^- S_{j_{b_k}}^+) \quad (2.3.14)$$

上式の右辺を展開すると、

$$Q(C_r) = \sum_{i=1}^{2^r} Q_i(C_r) \quad (2.3.15)$$

を得る。ただし、 $Q_i(C_r)$ は、(2.3.14) 式の右辺の展開の第 i 項を表し、最近接スピン対の演算子 $S_{i_i}^+ S_{j_i}^-$ や $S_{i_i}^- S_{j_i}^+$ が r 個混じり合った演算子の積からなっている。このような項の総数は 2^r である。理解し易くするために例を引いて示すことにする。図 2.1(a) に示されたような、 a, b, c, d および e なるラベルの付いた 5 個のサイトに各 1 個ずつスピンをもつ 1 次元環状格子系において、最近接スピン対 $\langle a, b \rangle, \langle b, c \rangle, \langle c, d \rangle, \langle d, e \rangle, \langle e, a \rangle$ を結ぶボンドの番号を順に 1, 2, 3, 4, 5 とする。 $N = 5, r = 6, Q = h_1 h_2 h_1 h_1 h_2 h_1$ 場合、(図 2.1(b) 参照)

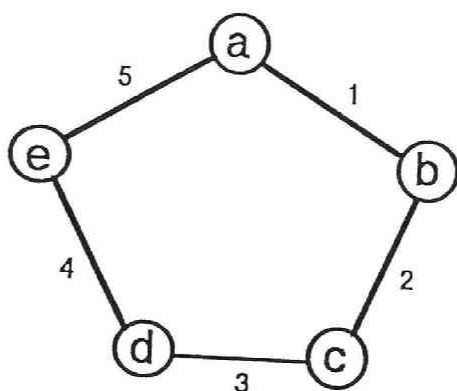
$$\begin{aligned}
Q &= h_1 h_2 h_1 h_1 h_2 h_1 \\
&= (S_a^+ S_b^- + S_a^- S_b^+) (S_b^+ S_c^- + S_b^- S_c^+) (S_a^+ S_b^- + S_a^- S_b^+) \\
&\quad \times (S_a^+ S_b^- + S_a^- S_b^+) (S_b^+ S_c^- + S_b^- S_c^+) (S_a^+ S_b^- + S_a^- S_b^+) \\
&= S_a^+ S_b^- S_b^+ S_c^- S_a^+ S_b^- S_a^+ S_b^- S_b^+ S_c^- S_a^+ S_b^- + \cdots \\
&\quad + S_a^+ S_b^- S_a^- S_b^+ S_b^+ S_c^- S_b^+ S_c^- S_a^+ S_b^- S_a^- S_b^+ + \cdots \\
&\quad + S_a^- S_b^+ S_b^- S_c^+ S_a^- S_b^+ S_a^- S_b^+ S_b^- S_c^+ S_a^- S_b^+
\end{aligned} \tag{2.3.16}$$

となり、全部で $2^6 = 64$ 項の和となる。上式の右辺の第 1 項は

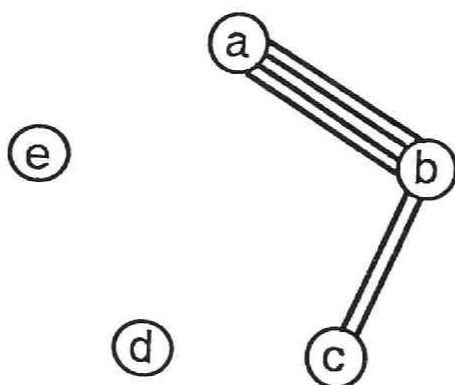
$$S_a^+ S_b^- S_b^+ S_c^- S_a^+ S_b^- S_a^+ S_b^- S_b^+ S_c^- S_a^+ S_b^- = S_a^+ S_a^+ S_a^+ S_a^+ S_b^- S_b^- S_b^- S_b^- S_b^+ S_b^+ S_c^- S_c^- \tag{2.3.17}$$

となる。ここに、異なるサイトにおけるスピン演算子同志は可換であることを用い、演算子の列を左から右に走査して同一のサイト毎にまとめた。また、上式の中程の項に対しても同様にして、

$$S_a^+ S_b^- S_a^- S_b^+ S_b^- S_c^+ S_b^+ S_c^- S_a^+ S_b^- S_a^- S_b^+ = S_a^+ S_a^- S_a^+ S_a^- S_b^- S_b^+ S_b^+ S_b^- S_b^+ S_b^- S_b^+ S_c^- S_c^- \tag{2.3.18}$$



(a)



(b)

図 2.1 (a) $N = 5$ の一次元環状格子系。a,b,c,d および e はサイトのラベル。 1,2,3,4 および 5 はボンド番号。

(b) (a) の格子系において、 $r=6$ の時の演算子 $Q = h_1 h_2 h_1 h_1 h_2 h_1$ に対するボンドの配置。

を得る。スピン $1/2$ の系においては、 $|+\rangle$ と $|-\rangle$ の2つのスピン状態しかないので、続けて2回以上 S^+ (あるいは S^-) を作用させると常に零となる。したがって、分配関数のトレース値に非零の寄与を与えるものは、少なくとも (2.3.18) 式の右辺に見られるように、同一サイト上において S^+ と S^- の出現順序が交互になっていなければならない。ここで、第1章で紹介した Betts 達 [17] によって考案された、スピン演算子を arrow によって図式的に表現することによって演算を代替する方法を用いることにする。つまり、やじりの付いている端を head で、他端を tail で記すことにすると、演算子 $S_i^+ S_j^-$ を、サイト i に head を、サイト j に tail をもつ arrow で表し、演算子 $S_i^- S_j^+$ を、サイト i に tail を、サイト j に head をもつ arrow で表す時、分配関数のトレース値に非零の寄与をするものは、つぎの2条件を満たすものだけに限られる [17,18,25,26]。

(条件1) 有向グラフの各頂点(サイト)において arrow の head と tail

の総数が同じであること。 (2.3.19)

(条件2) グラフの各頂点(サイト)において入矢と出矢の順序に従って

arrow の head と tail が交互になること。 (2.3.20)

図 2.2 は、(2.3.17) および (2.3.18) 式をこのグラフ表示として表した例である。ところで、(2.3.12) および (2.3.15) 式より、 a_r は演算子 $Q_k(C_r)$ による $(2N_b)^r$ 項のトレースの和で与えられることが分かる。そこで今、その中の一つとして、演算子 $Q_k(C_r)$ を含む項のトレースについて考えることにする。この演算子は上述の arrow によるグラフとして表示することができる。このとき、格子上には、各 arrow によって互いに連結し合ってきた、幾つかの独立した部分グラフ (これを、以後は便宜上、クラスターと呼ぶことにする。) や、幾つかの単独サイトによる孤立点などに分かれる。(図 2.3 参照) トレースを評価する際は、

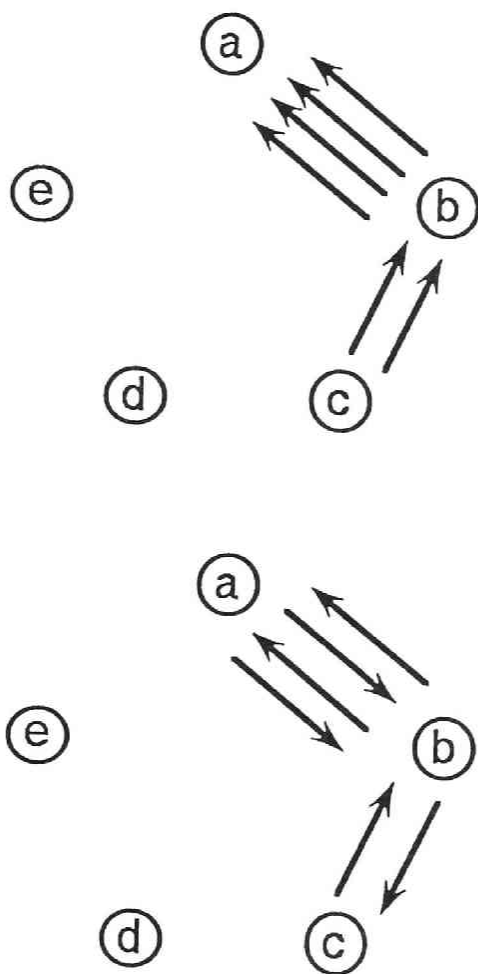


図 2.2 上図は演算子 $S_a^+ S_b^- S_b^+ S_c^- S_a^+ S_b^- S_a^+ S_b^- S_b^+ S_c^- S_a^+ S_b^-$ に対する arrow 表示を表す。

下図は演算子 $S_a^+ S_b^- S_a^- S_b^+ S_b^- S_c^+ S_b^+ S_c^- S_a^+ S_b^- S_a^- S_b^+$ に対する arrow 表示を表す。

$N = 10$ の一次元環状系

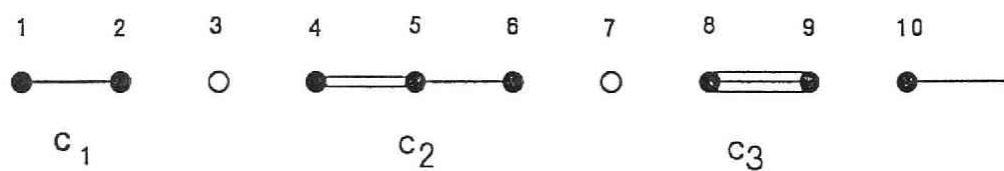


図 2.3 c_1 : サイト 1, 2 および 10 における 2 本のボンドからなるクラスター。
 c_2 : サイト 4, 5 および 6 における 3 本のボンドからなるクラスター。
 c_3 : サイト 8 および 9 における 3 本のボンドからなるクラスター。
 サイト 3 および 7 は孤立点である。

このクラスター毎に部分トレース値を求めて、それらの積をとることにより各項のトレース値を評価することができる。今、ボンドの組 (b_1, b_2, \dots, b_p) から成る独立した一つのクラスターに対する部分トレース

$$\text{Tr}\{S_{b_1} S_{b_2} \dots S_{b_p} \exp(L \sum_{m=1}^l S_{k_m}^z)\} \quad (2.3.21)$$

の値を求めよう。ただし、 S_b は演算子 $S_{i_b}^+ S_{j_b}^-$ かまたは $S_{i_b}^- S_{j_b}^+$ かの何れか一方を表し、添え字 b は最近接サイト対 $\langle i_b, j_b \rangle$ を結ぶボンド番号であり、 L は $\mu H/k_B T$ を表す。この独立したクラスターが l 個のサイト k_1, k_2, \dots, k_l を持つものとする。従って、 i_{b_n}, j_{b_n} ($n = 1, \dots, p$) はサイトの集合 $\{k_1, k_2, \dots, k_l\}$ に属している。このクラスターのスピン状態を $|s_{k_1} s_{k_2} \dots s_{k_l}\rangle$ で表すことにする。ここに、 s_{k_i} は上向きスピン（以後、up と記す。）か、または下向きスピン（以後、down と記す。）かのどちらかの一方の状態を示しているものとする。(2.3.21) 式中の演算子 $S_{b_1} S_{b_2} \dots S_{b_p}$ がこのスピン状態に対して、上述の2条件を満たせば、非零のトレース値に寄与する。つまり、

$$\begin{aligned} S_{b_1} S_{b_2} \dots S_{b_p} \exp(L \sum_{m=1}^l S_{k_m}^z) |s_{k_1} s_{k_2} \dots s_{k_l}\rangle \\ = \exp(L \sum_{m=1}^l s_{k_m}) |s_{k_1} s_{k_2} \dots s_{k_l}\rangle \end{aligned} \quad (2.3.22)$$

となる。また、同時に、

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{b_1} \tilde{S}_{b_2} \dots \tilde{S}_{b_p} \exp(L \sum_{m=1}^l S_{k_m}^z) |\tilde{s}_{k_1} \tilde{s}_{k_2} \dots \tilde{s}_{k_l}\rangle \\ = \exp(L \sum_{m=1}^l \tilde{s}_{k_m}) |\tilde{s}_{k_1} \tilde{s}_{k_2} \dots \tilde{s}_{k_l}\rangle \end{aligned} \quad (2.3.23)$$

も成り立つ。ただし、演算子 \tilde{S}_b は $S_b = S_{i_b}^+ S_{j_b}^-$ ならば $S_{i_b}^- S_{j_b}^+$ であることを表し、 \tilde{s}_{k_m} は s_{k_m} の逆転したスピン状態を表す。非零のトレース値に寄与する

ものは以上の2つの状態だけであるから、求めるトレースは

$$\exp(a_\alpha L) + \exp(-a_\alpha L) = 2 \cosh a_\alpha L \quad (2.3.24)$$

で与えられる。ただし、 α は、演算子の列を独立したクラスターに分解したときの第 α 番目のクラスターを表す番号であり、 a_α は、

$$a_\alpha = n_\alpha^+ - n_\alpha^- \quad (2.3.25)$$

で与えられる。ここに、 n_α^+ は α 番目のクラスターにおけるスピン状態 $|s_{k_1} s_{k_2} \cdots s_{k_l}\rangle$ での up の個数であり、 n_α^- は その down の個数である[26]。また、一方、孤立点におけるトレース値は以上の結果からすぐ分かるように、 $e^L + e^{-L} = 2 \cosh L$ で与えられる。孤立点の総数 s は、全サイト数 N から2個以上のサイトで構成された n_c 個のクラスターのもつサイト数の総和 n_v を引いたものと等しい ($s = N - n_v$)。したがって、 s 個の孤立点と、 n_c 個のクラスターとに分解されるとき、のトレース値は、

$$\tilde{A}(C'_r) = (2 \cosh L)^s \prod_{\alpha=1}^{n_c} (2 \cosh(a_\alpha L)) \quad (2.3.26)$$

で与えられる。ここに、 $\tilde{A}(C'_r)$ は (2.3.12) 式において演算子 $Q(C_r)$ を (2.3.15) 式のように展開したときの各項 C'_r に対するトレースを表している。 $\sum_{C'_r}$ における項数は全部で $(2N_b)^r$ 項ある。したがって、展開係数は

$$a_r = \sum_{C'_r} \tilde{A}(C'_r) \quad (2.3.27)$$

のように書き直される。以後は、簡単のために、 $\tilde{A}(C'_r)$ のチルダと、 C'_r のプライムを省いて、それぞれ、 $A(C_r)$ および C_r と表すことにする。

熱力学的諸量を評価するための $Z, \partial Z / \partial L$ および $\partial^2 Z / \partial L^2$ の展開係数は次のようにまとめられる。

$$Z = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{a_r}{r!} \tau^{-r} \quad (2.3.28)$$

に対しては、

$$a_r = \sum_{C_r} A(C_r), \quad A(C_r) = (2 \cosh L)^s \prod_{\alpha=1}^{n_c} \{2 \cosh(a_\alpha L)\} \quad (2.3.29)$$

である。零磁場の場合には、(2.3.29) 式は

$$A(C_r) = 2^s 2^{n_c} = 2^{N-n_v} 2^{n_c} \quad (2.3.30)$$

に帰着される。

$$\frac{\partial Z}{\partial L} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{b_r}{r!} \tau^{-r} \quad (2.3.31)$$

に対しては、

$$b_r = \sum_{C_r} B(C_r), \quad B(C_r) = A(C_r) \left[s \tanh L + \sum_{\alpha=1}^{n_c} a_\alpha \tanh(a_\alpha L) \right] \quad (2.3.32)$$

および、

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial L^2} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{d_r}{r!} \tau^{-r} \quad (2.3.33)$$

に対しては、

$$d_r = \sum_{C_r} D(C_r), \quad (2.3.34)$$

$$D(C_r) = A(C_r) \left[s \operatorname{sech}^2 L + \sum_{\alpha=1}^{n_c} \{a_\alpha \operatorname{sech}(a_\alpha L)\}^2 + \left\{ s \tanh L + \sum_{\alpha=1}^{n_c} a_\alpha \tanh(a_\alpha L) \right\}^2 \right] \quad (2.3.35)$$

である。零磁場の場合は、(2.3.35) 式は

$$D(C_r) = 2^s 2^{n_c} \left[s + \sum_{\alpha=1}^{n_c} a_\alpha^2 \right] \quad (2.3.36)$$

に帰着される。

2.4 熱力学的諸量

熱力学的諸量は分配関数 Z を微分することによって導き出せる。エントロピー、内部エネルギーおよび比熱は、

$$\frac{S}{Nk_B} = \frac{1}{N} \ln Z + \frac{\tau}{N} \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \tau}, \quad (2.4.1)$$

$$\frac{E}{NJ} = \frac{\tau^2}{N} \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \tau} - \frac{1}{2} \frac{q}{2}, \quad (2.4.2)$$

および

$$\frac{C_H}{NJ} = \frac{\tau^2}{N} \left[\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \tau^2} + \frac{2}{\tau} \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \tau} - \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \tau} \right)^2 \right], \quad (2.4.3)$$

で与えられる。ただし、 q は格子サイトの配位数である。磁化および帯磁率は

$$\frac{M}{N\mu} = \frac{1}{N} \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial L}, \quad (2.4.4)$$

$$\frac{k_B T \chi}{N\mu^2} = \frac{1}{N} \left[\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial L^2} - \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial L} \right)^2 \right], \quad (2.4.5)$$

で与えられる。零磁場での帯磁率 χ_0 は

$$\frac{k_B T \chi_0}{N\mu^2} = \frac{1}{N} \frac{1}{Z} \sum_{r=0}^{\infty} \frac{d_r}{r!} \tau^{-r}, \quad (2.4.6)$$

で与えられる。ただし、 d_r 中の $D(C_r)$ はハイゼンベルク模型に対しては、(2.2.18) 式で、XY模型に対しては、(2.3.36) 式で与えられる。

第3章 展開係数のモンテカルロ評価法

— ハイゼンベルク模型の場合 —

3.1 序文

前章では、ハイゼンベルク模型およびXY模型ともに z 方向に外部磁場が印加された時のモーメント展開における展開係数の厳密な公式を導き出した。本章以後では、評価すべき展開係数 a_r および d_r を零磁場の場合に限って考えることにする。また、展開係数の厳密値を得ることは、多くの場合不可能であるので、ここではモンテカルロ法によって近似値を求めることにする。XY模型については次章に譲ることにして、本章では、ハイゼンベルク模型に対する展開係数を評価するためのモンテカルロ法について述べることにする。ところで、その評価の手続きは2段階に分けられる。第一段階では、 M 個の展開係数 (M は10個程度) が偏りのないモンテカルロ法によって評価される。その詳細については次節で述べる。第二段階は残りの展開係数が、次章で詳説する Padé 型有理関数の公式を用いた内挿式によって評価される。 M 個の指定された r (言うなれば、昇順に r_1, r_2, \dots, r_M) に対する a_r および d_r が偏りのないモンテカルロ法により評価される。つまり、第 r 項の係数を評価するために、 r 個の整数 b_1, b_2, \dots, b_r を集合 $\{1, 2, \dots, N_b\}$ から無作為に復元抽出によって選び出し、(2.2.5) 式で与えられるような $P(C_r)$ をつくり、それから $A(C_r)$ を計算する。この手続きを N_s 回繰り返して、 $A(C_r) (\equiv a_r/N_b^r)$ の平均値 $\overline{A_r}$ 、および a_r の

モンテカルロ・サンプリングによる値（以後は、MC値と略記する。） \bar{a}_r を得る。

これらは、

$$\bar{A}_r = \sum_{MC} A(C_r) / N_s, \quad (3.1.1a)$$

および

$$\bar{a}_r = N_b \bar{A}_r, \quad (3.1.1b)$$

で与えられる。ただし、 \sum_{MC} は N_s 個のモンテカルロ・サンプルについての和である。同様に、 \bar{D}_r および \bar{d}_r が得られる。これらの値を得るには (2.2.4) 式から分かるように、まず無作為に復元抽出によって C_r に対する互換の積 $P(C_r)$ を生成する必要がある。次に、この $P(C_r)$ を (2.2.6) 式における $P(C_r) = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & N \\ k_1 & k_2 & k_3 & \cdots & k_N \end{pmatrix}$ の形の位数 N の置換に変換しなければならない。このための高速変換アルゴリズムを開発したので第 3.2.1 項で述べることにする。これを更に (2.2.6) 式の右辺のような巡回置換の積に分解する必要がある。これについては第 3.2.2 項で分かりやすく例を引いて述べるとともにそれをアルゴリズムとしてまとめることにする。この段階で与えられた置換 $P(C_r)$ における独立した巡回置換の個数 ($k(C_r)$) と各サイクルの長さの 2 乗和 ($\sum_{i=1}^N \nu_i l^2$) を求めることができ、(2.2.11) 式と (2.2.18) 式からすぐ分かるように $A(C_r)$ および $D(C_r)$ が評価できる。その手続きの詳細を次節で述べることにする。

3.2 置換のサイクル分解

N_b 個のボンドに 1 から N_b まで予め一意的に番号が付けられていて、ボンド番号 b_k のボンドは最近接サイト i_{b_k} および j_{b_k} を結んでいるものとしよう。このとき、(2.2.5) 式で与えられる互換の積としての $P(C_r)$ は集合 $\{1, 2, \dots, N_b\}$

から復元抽出により無作為に r 個の整数 b_1, b_2, \dots, b_r を選ぶことによって簡単に構成できる。 $P(C_r)$ のサイクル分解のためのコンピュータ・プログラムを書くとき、2つの一次元配列を用いると便利である。 その中の1つはサイト i_{b_k} 用の配列 SI であり、もう1つはサイト j_{b_k} 用の配列 SJ である。両配列の添え字をそのスピン対のボンド番号 b_k と対応付け、スピン・サイトの番号 i_{b_k} および j_{b_k} を、それぞれ配列 SI および SJ に格納しておく。つまり、

$$\text{SI}(b_k) \leftarrow i_{b_k}, \quad \text{SJ}(b_k) \leftarrow j_{b_k}, \quad (b_k = 1, 2, \dots, N_b)$$

のようにする。 ただし、 i_{b_k} および j_{b_k} の値は考察下の格子構造に依存している。これらの配列は常に参照表として利用される。 例として、境界条件付きの 3×3 正方格子上の最近接サイトとそれらを結ぶボンドの番号付けが図 3.1 と表 3.1 に示されている。

3.2.1. 置換の高速変換アルゴリズム

さて、 r 個の整数 b_1, b_2, \dots, b_r で指定される $P(C_r)$ を (2.2.6) 式の右辺の形に分解するとしよう。このとき、 $P(C_r)$ を構成し、それを分解することは、コンピュータ・プログラム上では同時に行える。これについては、演算子 $(i_{b_k} j_{b_k})$ が両サイト i_{b_k} および j_{b_k} のスピン状態を入れ換える作用をすることと、 $P(C_r)$ が位数 N の置換であることに注目すべきである。これから述べるサイクル分解のため簡単なアルゴリズムは、実に、この事実から導かれるのである。このアルゴリズムにおいて、まず最初、大きさが N の配列 PCR を

$$\text{PCR}(i) \leftarrow i \quad (i = 1, \dots, N).$$

のように初期化する。その後で、次の変換を r 回繰り返す。

$$\text{TMP} \leftarrow \text{PCR}(i_{b_k}), \quad \text{PCR}(i_{b_k}) \leftarrow \text{PCR}(j_{b_k}), \quad \text{PCR}(j_{b_k}) \leftarrow \text{TMP} \quad (k = 1, \dots, r)$$

表 3.1 3×3 正方格子におけるボンド b_k と最近隣スピンサイト

i_{b_k} および j_{b_k} の番号付け

b_k	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
SI	1	2	3	4	5	6	7	8	9	1	2	3	4	5	6	7	8	9
SJ	2	3	1	5	6	4	8	9	7	4	5	6	7	8	9	1	2	3

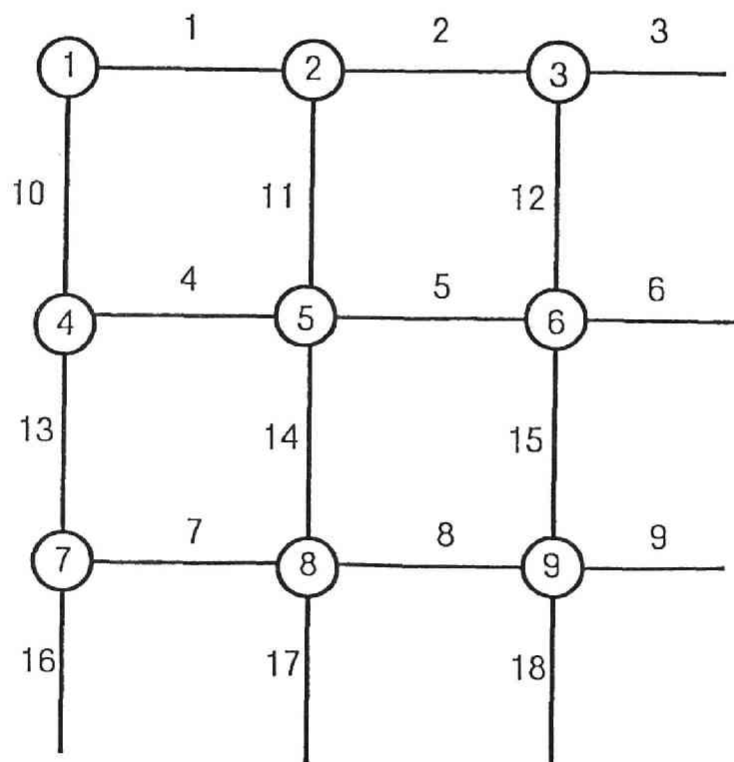


図 3.1 3×3 正方格子におけるサイトとボンドの番号付け。

ここに、TMP は一時的変数であり、そして、 $SI(b_k)$ および $SJ(b_k)$ に格納されたそれぞれの数、 i_{b_k} および j_{b_k} は無作為に選ばれたボンド番号 b_k に対応する最近接サイトを表す。この手続きを r 回繰り返せば、次の形の置換 $P(C_r)$ を得ることができる。

$$P(C_r) = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & N \\ k_1 & k_2 & k_3 & \cdots & k_N \end{pmatrix} \quad (3.2.1)$$

ただし、 $k_i (i = 1, \dots, N)$ は添え字 i をもつ配列 PCR に格納される。つまり、 $k_i = \text{PCR}(i)$ である。このことは、演算子 $P(C_r)$ が r 回の交換を行うだけで独立したサイクルに分解できるので、大変好ましい性質である。結果として、演算子 $P(C_r)$ はただ一回だけ走査される[40]。このことを、次の第 3.2.2 項で一例をあげて説明する。

3.2.2. サイクル分解の例

例として、表 3.2 に、 $N = 3 \times 3$ 場合で、 $r = 10$ の時に、無作為に選ばれたある列 $C_r = (1, 9, 9, 8, 11, 16, 3, 14, 4, 2)$ に対する $P(C_r) = (1\ 2)(9\ 7)(9\ 7)(8\ 9)(2\ 5)(7\ 1)(3\ 1)(5\ 8)(4\ 5)(2\ 3)$ の独立したサイクルへの分解の過程を示す。ボンド番号とサイト番号との対応は、図 3.1 に示されている。表 3.2 の (a) の場合の置換

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 \\ 3 & 7 & 5 & 9 & 4 & 6 & 2 & 1 & 8 \end{pmatrix}$$

は左から右に互換を作用させて得られる。そして、(b) の場合の置換

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 \\ 8 & 7 & 1 & 5 & 3 & 6 & 2 & 9 & 4 \end{pmatrix}$$

は右から左に互換を作用させて得られる。トレースを得るには、独立したサイクルの個数とそれらの長さのみが必要であるので、互換の操作の方向は重要ではない。(a) の場合の $P(C_r)$ の巡回置換に分解された型は $(1\ 3\ 5\ 4\ 9\ 8)(2\ 7)(6)$ で

表 3.2 無作為抽出された列 $C_r = (1, 9, 9, 8, 11, 16, 3, 14, 4, 2)$ に対する置換 $\mathcal{P}(C_r) = (1\ 2)(9\ 7)(9\ 7)(8\ 9)(2\ 5)(7\ 1)(3\ 1)(5\ 8)(4\ 5)(2\ 3)$ を独立したサイクルに分解する過程の説明。
 ケース (a) は左から右への走査、ケース (b) は右から左への走査を示す。

ケース (a)

ステップ	互換	PCR								
0-th	(1 2)	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1-st	(9 7)	2	1	3	4	5	6	7	8	9
2-nd	(9 7)	2	1	3	4	5	6	9	8	7
3-rd	(8 9)	2	1	3	4	5	6	7	8	9
4-th	(2 5)	2	1	3	4	5	6	7	9	8
5-th	(7 1)	2	5	3	4	1	6	7	9	8
6-th	(3 1)	7	5	3	4	1	6	2	9	8
7-th	(5 8)	3	5	7	4	1	6	2	9	8
8-th	(4 5)	3	5	7	4	9	6	2	1	8
9-th	(2 3)	3	5	7	9	4	6	2	1	8
10-th		3	7	5	9	4	6	2	1	8

$$\mathcal{P}(C_r) = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 \\ 3 & 7 & 5 & 9 & 4 & 6 & 2 & 1 & 8 \end{pmatrix} = (1\ 3\ 5\ 4\ 9\ 8)(2\ 7)(6)$$

ケース (b)

ステップ	互換	PCR								
0-th	(2 3)	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1-st	(4 5)	1	3	2	4	5	6	7	8	9
2-nd	(5 8)	1	3	2	5	4	6	9	8	7
3-rd	(3 1)	1	3	2	5	8	6	7	4	9
4-th	(7 1)	2	3	1	5	8	6	7	4	9
5-th	(2 5)	7	3	1	5	8	6	2	4	9
6-th	(8 9)	7	8	1	5	3	6	2	4	9
7-th	(9 7)	7	8	1	5	3	6	2	9	4
8-th	(9 7)	7	8	1	5	3	6	4	9	2
9-th	(1 2)	7	8	1	5	3	6	2	9	4
10-th		8	7	1	5	3	6	2	9	4

$$\mathcal{P}(C_r) = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 \\ 8 & 7 & 1 & 5 & 3 & 6 & 2 & 9 & 4 \end{pmatrix} = (1\ 8\ 9\ 4\ 5\ 3)(2\ 7)(6)$$

与えられ、(b) の場合には $(1\ 8\ 9\ 4\ 5\ 3)(2\ 7)(6)$ で与えられる。(a) の場合には、分解は次のようにして行われる。まず、上段の最左端の整数 1 からはじめその直下の 3 を確認し、つぎに、上段において 3 を探し、もし見つければ、その直下の整数を確認する。今の場合は 5 である。更に上段においてこの整数 5 を探す。もし見つかったらその直下の整数を確認する。今度は、4 である。このような手順を、出発したときの整数 1 と同じ値が下段で見つかるまで、繰り返す。この時点で、6 サイクルの巡回置換 $(1\ 3\ 5\ 4\ 9\ 8)$ を得る。次に、今求めた巡回置換の要素としては含まれていない整数で、上段において最も左にある数を見つけて、二つ目の出発値とする。今の場合は 2 である。この整数を元に先ほどのやり方を行うと、今度は 2 サイクルの巡回置換 $(2\ 7)$ を得る。最後は、1 サイクルの置換 (6) を得る。

さて、この変換のためのアルゴリズムを詳しく述べよう。

置換 $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & N \\ k_1 & k_2 & k_3 & \cdots & k_N \end{pmatrix}$ は次のものと同一視することができる。つまり、置換の上段の整数 i は配列 PCR の添え字と対応付け、下段の整数 k_i は配列の内容 $\text{PCR}(i)$ と対応付けることができる。この配列の情報を用いて上述の例と同じ手続きを実行する。このアルゴリズムを次に示そう。ただし、 j 番目のサイクルの長さは $\text{CYCL}(J)$ に格納され、そのサイクルの個数は NCYCL に格納される。

- (1) [初期化] $I \leftarrow 1, \quad J \leftarrow 1$ とおく。
- (2) $\text{START} \leftarrow I, \quad \text{LEN} \leftarrow 1, \quad \text{IDX} \leftarrow I, \quad \text{EL} \leftarrow \text{PCR}(\text{IDX}).$
- (3) [START が EL 等しいか?]

もしそうであれば、ステップ 4 へ。

それ以外の時

$\text{PCR}(\text{IDX}) \leftarrow 0, \quad \text{IDX} \leftarrow \text{EL}, \quad \text{LEN} \leftarrow \text{LEN} + 1, \quad \text{EL} \leftarrow \text{PCR}(\text{IDX}).$

ステップ 3 を繰り返す。

(4) $\text{PCR}(\text{IDX}) \leftarrow 0$. $\text{CYCL}(\text{J}) \leftarrow \text{LEN}$. $\text{J} \leftarrow \text{J} + 1$. $\text{I} \leftarrow \text{I} + 1$.

(5) [I が N より大きいのか?]

もしそうであれば、ステップ 6 へ.

[PCR(I) が 0 に等しいか?]

もしそうでなければ、ステップ 2 へ. それ以外の場合、 $\text{I} \leftarrow \text{I} + 1$.

ステップ 5 を繰り返す.

(6) $\text{NCYCL} \leftarrow \text{J} - 1$.

この手続きはスカラー・マシン向きでベクトル・マシン向きにはなっていない。ベクトル・マシン向きのアルゴリズムには今後改良していくことが残されている。

3.2.3. トレースの評価

前の第 3.2.2 項で与えられた手続きによって、与えられた列 C_r の (長さ 1 の自明なものも含めた) 独立したサイクルの個数 $k(C_r)$ と、それらのサイクルの長さ l が、得られる。

(2.2.11) 式と (3.1.1) 式からも分かる通り、 \overline{A}_r を得るにはあらゆる無作為抽出された C_r に対するサイクルの個数 $k(C_r)$ のみが要求されるし、 \overline{D}_r を得るためには、(2.2.18) 式から分かる通り、更に l^2 の和が得られればよい。この目的に対しては、次のような前処理を行っておくと都合がよい。 $k(C_r)$ の度数を累算しておくために、配列 KCR を用いることにする。この配列の添え字 i の値と置換 $P(C_r)$ の独立したサイクルの個数 $k(C_r)$ の値とが相い等しいとすると、KCR(i) の内容は N_s 個のサンプル中で $i = k(C_r)$ 個の独立なサイクルをもつ $P(C_r)$ の度数を与える。一方、NU2 に代入された $\sum_{i=1}^N u_i l^2$ の値を累算するために、同一の添え字 i をもつもう一つの配列 SL2 を用いる。つまり、SL2 (i)

は N_s 個のサンプル中で $i = k(C_r)$ 個の独立なサイクルをもつ $P(C_r)$ に対する NU2 の和を与える。われわれは、任意の 2 つの演算子 $P(C_r)$ および $P(C'_r)$ に対して、両演算子に対する NU2 が、例えば $k(C_r) = k(C'_r)$ であっても必ずしも同一の値をとるとは限らないことに気をつけなければならない。プログラムリスト 1 において、次の操作が両配列を用いて行われる。

$$\text{KCR}(i) \leftarrow \text{KCR}(i) + 1 \quad \text{および} \quad \text{SL2}(i) \leftarrow \text{SL2}(i) + \text{NU2}, \quad (i = 1, \dots, N),$$

ただし、このプログラムリストにおいて、配列 KCR は INTEGER 型として、配列 SL2 および変数 NU2 は REAL 型として宣言されている。表 3.3 に数値例として、スピンサイズ $N = 10 \times 10$ に対して、それぞれ $r = 5, 150$ および 10,000 に対する $i(\equiv k(C_r))$, $\text{KCR}(i)$ および $\text{SL2}(i)$ が、 $N_s = 10^5$ に対して与えられている。例えば、 $r = 150$ の場合の $i = 24$ に対して、 $\text{KCR}(i) = 17151$ は $k(C_r) = 24$ をもつ $P(C_r)$ の度数を与える。 $\text{SL2}(i) = 3.296241 \cdot 10^7$ は $N_s = 10^5$ 中で $\text{KCR}(i) = 17151$ をとる、(2.2.18) 式中での NU2 (つまり、 $\sum_{l=1}^N \nu_l l^2$) の和である。 \overline{A}_r を得る際、全部で N_s 個のサンプルに対して (2.2.11) 式中の 2 の $k(C_r)$ 乗の値を評価しなければならない。ところが、上述の度数を用いれば、相異なる $k(C_r)$ に対する 2 のべき乗のみを評価すれば、 \overline{A}_r を得ることができる。つまり、

$$\overline{A}_r = \frac{1}{N_s} \sum_i \text{KCR}(i) \cdot 2^i,$$

である。表 3.3 の $r = 150$ の数値例では、 \overline{A}_r は僅か 21 個の $A(C_r)$ だけを評価すれば得られる。他方、 \overline{D}_r はこれら 21 個の $A(C_r)$ に、それぞれ SL2 の対応する値を掛けることによって得られる。つまり、

$$\overline{D}_r = \frac{1}{N_s} \sum_i \text{KCR}(i) \cdot 2^i \cdot \text{SL2}(i).$$

である。

表 3.3 $N = 10 \times 10$ 系おける、それぞれ $r = 5, 150$ および $10,000$ の場合の $N_s = 10^5$ 個のサンプルを用いた $i(\equiv k(C_r))$, $KCR(i)$ および $SL2(i)$ の数値例

r	i	$KCR(i)$	$SL2(i)$
5	95	94968	$1.050649 \cdot 10^7$
	97	4995	$5.303880 \cdot 10^5$
	99	37	$3.774000 \cdot 10^3$
150	6	1	$8.304000 \cdot 10^3$
	8	9	$5.528600 \cdot 10^4$
	10	68	$3.531260 \cdot 10^5$
	12	382	$1.725730 \cdot 10^6$
	14	1280	$4.991066 \cdot 10^6$
	16	3396	$1.163996 \cdot 10^7$
	18	7053	$2.089823 \cdot 10^7$
	20	11560	$2.951696 \cdot 10^7$
	22	15451	$3.405946 \cdot 10^7$
	24	17151	$3.296241 \cdot 10^7$
	26	15647	$2.597454 \cdot 10^7$
	28	12035	$1.738982 \cdot 10^7$
	30	7926	$1.007998 \cdot 10^7$
	32	4415	$4.931330 \cdot 10^6$
	34	2194	$2.163426 \cdot 10^6$
	36	938	$8.213300 \cdot 10^5$
	38	340	$2.728040 \cdot 10^5$
10000	40	117	$7.843800 \cdot 10^4$
	42	26	$1.544600 \cdot 10^4$
	44	7	$3.458000 \cdot 10^3$
	46	4	$2.206000 \cdot 10^3$
	2	10227	$8.281278 \cdot 10^7$
	4	38555	$2.196572 \cdot 10^8$
	6	35487	$1.521444 \cdot 10^8$
	8	12991	$4.330956 \cdot 10^7$
	10	2451	$6.585172 \cdot 10^6$
	12	273	$6.034400 \cdot 10^5$
	14	15	$2.681600 \cdot 10^4$
	16	1	$1.272000 \cdot 10^3$

プログラムリスト 1

```

C *****
  PROGRAM FR2D
C *****

PARAMETER (MS1=1024,MS2=2*MS1)
INTEGER BK,N,NB,NBMN,NCYCL,NN,NM1,NS
INTEGER I,IDX,II,I1,J,J1
INTEGER EL,R,TMP
INTEGER CYCL(MS1),PCR(MS1),KCR(MS1),SI(MS2),SJ(MS2)
REAL    NU2,TL2,SL2(MS1)

```

ポータブル乱数発生器 RAN2 のための変数と定数の宣言

```

INTEGER IY,IDUM,IR(97)
PARAMETER (M=714025,IA=1366,IC=150889,RM=1.4005112E-6)

```

ファイル FR2D.RAN に予め保管されている乱数の種が切り混ぜ用配列 IR に復元される。

```

OPEN (UNIT=3,FILE='FR2D.RAN',STATUS='OLD')
READ (3,*) IY,IDUM
READ (3,*) (IR(I),I=1,97)
CLOSE (3)

WRITE(*,*) 'Input linear spin size N (N x N):'
READ (*,*) N
NN=N*N
NB=2*NN
NM1=N-1
NBMN=NB-N

```

周期境界条件をもつ $N \times N$ 正方格子に対するボンド番号 b_k に対応する最近接サイトの参照表を作成する。

```

DO 110 BK=1,NB
  IF (BK.LE.NN) THEN
    IF (MOD(BK,N).EQ.0) THEN
      SI(BK) = BK
      SJ(BK) = BK - NM1
    ELSE

```

```

        SI(BK) = BK
        SJ(BK) = BK + 1
    ENDIF
ELSE
    IF (BK.GT.NBMN) THEN
        SI(BK) = BK - NN
        SJ(BK) = BK - NBMN
    ELSE
        SI(BK) = BK - NN
        SJ(BK) = SI(BK) + N
    ENDIF
ENDIF
110 CONTINUE
200 WRITE(*,*) 'Input a term and # of samples.'
    READ (*,*) R,NS

```

MC値 \bar{A} , および \bar{D} , を得るために (2.2.11) 式中の $k(C_r)$ と (2.2.18) 式中の l^2 の和が N_s 個のサンプルについて計算される。

```
DO 210 I=1,NS
```

置換演算子 $\mathcal{P}(C_r)$ のための配列 PCR が初期化される。

```

        DO 220 I1=1,NN
            PCR(I1) = I1
220 CONTINUE

```

以下の DO ループにおいて、ある一つの演算子 $\mathcal{P}(C_r)$ を生成しながら、同時に (3.2.1) 式の右辺の形に変換される。

```
DO 230 J=1,R
```

Press 達によるポータブル乱数発生器 RAN2 がインライン・コードとして用いられる。詳細は次の教科書を参照されたい。

W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky and
W.T. Vetterling, *Numerical Recipes*
(Cambridge University Press, Cambridge, 1987)
Chapter 7, page 197.

```

        L=1+(97*IY)/M
        IF(L.GT.97.OR.L.LT.1)PAUSE
        IY=IR(L)

```

```

        IDUM=MOD(IA*IDUM+IC,M)
        IR(L)=IDUM
        BK = 1+INT(NB*(IY*RM))
        TMP = PCR(SI(BK))
        PCR(SI(BK)) = PCR(SJ(BK))
        PCR(SJ(BK)) = TMP
230  CONTINUE

```

演算子 $\mathcal{P}(C_r)$ が (2.2.6) 式の右辺におけるような独立したサイクルに分解され、各 C_r に対する $k(C_r)$ と l^2 の和が求められる。

```

        I1=1
        J1=1
240  START=I1
        LEN=1
        IDX=I1
        EL=PCR(IDX)
242  IF (START.EQ.EL) GOTO 244
        PCR(IDX) = 0
        IDX = EL
        LEN = LEN+1
        EL=PCR(IDX)
        GOTO 242
244  PCR(IDX) = 0
        CYCL(J1) = LEN
        J1 = J1+1
        I1 = I1+1
246  IF (I1.GT.NN) GOTO 248
        IF (PCR(I1).NE.0) GOTO 240
        I1 = I1+1
        GOTO 246
248  NCYCL=J1-1
        NU2 = 0.0D0
        DO 250 J1=1,NCYCL
            TL2 = CYCL(J1)
            NU2 = NU2 + TL2*TL2
250  CONTINUE
        KCR(NCYCL) = KCR(NCYCL) + 1
        SL2(NCYCL) = SL2(NCYCL) + NU2
210 CONTINUE

```

あらゆる $P(C_r)$ に対して、 $k(C_r)$ によって分類された類別の度数と I^2 の和を求める。

```
OPEN (UNIT=1,FILE='FR2D.DAT',ACCESS='APPEND',STATUS='OLD')
WRITE(*,*) NN,R,NS
WRITE(1,*) NN,R,NS
DO 260 I=1,NN
  IF (KCR(I).EQ.0) GOTO 260
  WRITE(*,'(2I10,E14.7)') I,KCR(I),SL2(I)
  WRITE(1,'(2I10,E14.7)') I,KCR(I),SL2(I)
260 CONTINUE
```

N_r 個のサンプルを一組のデータとするための終端子としてダミーに $k(C_r)$ ($= -1$) を用いて区切る。

```
WRITE(1,'(2I10,E14.7)') -1,0,0.0
CLOSE(1)
```

切り混ぜ用配列 IR の内容が次回の使用のためにファイル FR2D.RAN に保管される。

```
OPEN (UNIT=3,FILE='FR2D.RAN',STATUS='NEW')
WRITE(3,*) IY,IDUM
WRITE(3,*) (IR(I),I=1,97)
CLOSE (3)
```

```
END
```

第4章 展開係数のモンテカルロ評価法

— X Y 模型の場合 —

4.1 序文

X Y 模型の場合の熱力学的諸量を評価するには、まず (2.3.29) 式および (2.3.34) 式の展開係数を求める必要があるが、その為の方法は、前章の第 3.1 節で与えた (3.1.1.a) 式および (3.1.1b) 式と同様な形式によって得られる。便宜上、両式を改めて書き直しておく。

$$\overline{A}_r = \sum_{MC} A(C_r) / M_s, \quad (4.1.1a)$$

および

$$\overline{a}_r = N_b^{-1} \overline{A}_r, \quad (4.1.1b)$$

ただし、 \overline{A}_r は $A(C_r)$ の平均値、 \overline{a}_r は a_r の MC 値を表し、そして、 M_s はサンプル数であり、 $A(C_r)$ は零磁場に対しては (2.3.30) 式で与えられる。また、 \overline{D}_r および \overline{d}_r についても同様である。ところで、 $A(C_r)$ および $D(C_r)$ の評価法は前節のハイゼンベルク模型のものとは、全く異なっているので、本章では、それについて詳しく述べることにする。

単純に、偏りのないサンプリング法によって、これらの $A(C_r)$ および $D(C_r)$ を求めようとする、 r が大きくなるにつれ、2 条件 ((2.3.19) および (2.3.20) 式) を満たすものが、急激に減少することにより、妥当な数値を得るには実現不可能なサンプル数が要求される。そこでわれわれは、非零のトレース値に寄与す

る項を重点的に抽出するような偏りをもつサンプリング法を用いることにした。そのキーポイントは前述の条件1にある。条件1は各サイトにおいて、arrowのheadとtailの総数が互いに同数個ずつでなければならないことであった。そこで、まず指定された r に対して、arrowとしてでなく、つまり、方向を持たないボンドを無作為に $r'(\equiv r/2)$ 個復元抽出することにする。こうして選ばれた r' 個の各ボンドを、今度は互いに反対向きの2本のarrowと見なすのである。これにより、先ほどの r' 個のボンドは r 本のarrowとなり、しかも、条件1を自動的に満たすことになる。この手続きによっても非零のトレース値を与える項のみが抽出できた訳ではないが、零トレースを与える大半の項を除くことができるので、展開係数の値として満足のできる結果が得られる。本当に非零トレースを与えるものは、この中から更に条件2を満足するものに限られる。ここで断っておくが、 r は偶数であるものと仮定している。この仮定は、偶数個のスピンをもつ場合の一次元環状系や二次元正方格子系には許されるが、三角格子系などの奇数個のボンドによっても2条件を満たすことができる格子系には問題が残る。

さて、それでは今述べた線に沿ってサンプルされた各項のトレース値を評価し、展開係数のMC値を求める手続きの概略を3つの手続きに分けて示すことにする。

手続き1

- (1) 内挿点となる項 r とその項の展開係数をMC評価するためのサンプル数 M_s を指定する。ただし、 r は偶数とする。
- (2) 与えられた格子上で一意的に番号付けされたボンドの中から無作為に $r/2$ 個のボンドを復元抽出する。
- (3) ステップ2で抽出されたボンドの与えられた格子上での配置における、同一ボンドに関する重複度 M を求める。

- (4) それらのボンドが格子上につくる独立したクラスターを調べ、その個数 n_c を求める。

手続き 2

手続き 1 のステップ 4 で求めたクラスターの中から異種タイプのものについてのみ、この手続きを行う。

- (5) 一本のボンドを互いに反対向きの二本の arrow と解して、与えられたクラスターに対する、arrow を参照表に記帳する。
- (6) 現クラスターによる部分トレースをモンテカルロ法によって評価するための反復回数 i を指定する。
- (7) 参照表内の arrow に無作為に順番をつける。
- (8) それらの arrow が条件 2 を満たしているかチェックし、トレースに非零の寄与をするものであればその度数を 1 だけ増やす。
- 以上のステップ 7 および 8 を i 回繰り返す。
- (9) 非零トレース率

$$W = (\text{サンプル中の非零トレースの個数}) / (\text{サンプル数})$$

を求める。

更に、各 arrow の重複度で W を割っておく。

手続き 3

- (10) トレース値 T を計算する。
- (11) $A(C_r)$ の MC 値 $W \times T/M$ を計算する。
- (12) ステップ 11 までで得られた M_s 個のサンプルを用いて、(4.1.1a および b) 式により展開係数を求める。

以下の節でこれらの手続きの詳細を述べることにする。

4.2 非零トレース値に寄与するクラスターの抽出（手続き 1）

前節で示したステップ 1, 2 および 4 は容易に理解ができると思うので、ここでは、ステップ 3 についてのみ詳しく述べることにする。 N_b 個のボンドがあるとき、重複も許して $r' (\equiv r/2)$ 個を選び出す場合の数は、 $N_b^{r'}$ 通りである。

これを（選ばれたボンドとそれに対応するサイトによって生成される）グラフのタイプ別に分類した時、全部で t 個の相異なるタイプ $T_i (i = 1, 2, \dots, t)$ に分かれたとする。このとき、タイプ T_i に属するものが ν_i 個あるとすると、

$$\sum_{i=1}^t \nu_i = N_b^{r'} \quad (4.2.1)$$

である。そして、各タイプのグラフにおけるボンドの総数は r' である。

今、ある一つのグラフ G が、 b_1 ボンドを q_1 個、 b_2 ボンドを q_2 個、 \dots , b_p ボンドを q_p 個の計 r' 個のボンドから成っているものとする。つまり、

$$r' = q_1 + q_2 + q_3 + \dots + q_p \quad (4.2.2)$$

である。ところで、 r' 個のボンドの順列は $r'!$ 通りあるが、この r' 個のボンドの選択順序を考慮しないとき、全く同一のグラフとなるものの数は、

$$m_i \equiv \frac{r'!}{q_1! q_2! \dots q_p!}, \quad (i = 1, \dots, t) \quad (4.2.3)$$

で与えられる。この時、各タイプ T_i は、 ν_i/m_i 個のメンバーを持つ。

例として、図 2.1(a) に示した $N = 5, N_b = 5$ の一次元環状格子を用いることにする。いま、 $N_b = 5$ 個のボンドから 3 個のボンドを復元抽出すると、全部で $N_b^3 = 5^3 = 125$ 通りの場合の数がある。そのすべてを表 4.1 に示す。この表の括弧内の記号 $T_i, (i = 1, \dots, 5)$ はグラフとして相異なるタイプを識別するために用いる。この表から、タイプ T_1, T_2, T_3, T_4 , および T_5 に属するグラフの数

表 4.1 $N = 5$, $N_b = 5$ の時、 $r' = 6/2 = 3$ 個のボンドを選び出す全ての
場合 (125 通り)。

ラベル $T_i (i = 1, \dots, 5)$ によってタイプを類別している。

111	(T_1)	211	(T_2)	311	(T_3)	411	(T_3)	511	(T_2)
112	(T_2)	212	(T_2)	312	(T_4)	412	(T_5)	512	(T_4)
113	(T_3)	213	(T_4)	313	(T_3)	413	(T_5)	513	(T_5)
114	(T_3)	214	(T_5)	314	(T_5)	414	(T_3)	514	(T_4)
115	(T_2)	215	(T_4)	315	(T_5)	415	(T_4)	515	(T_2)
121	(T_2)	221	(T_2)	321	(T_4)	421	(T_5)	521	(T_4)
122	(T_2)	222	(T_1)	322	(T_2)	422	(T_3)	522	(T_3)
123	(T_4)	223	(T_2)	323	(T_2)	423	(T_4)	523	(T_5)
124	(T_5)	224	(T_3)	324	(T_4)	424	(T_3)	524	(T_5)
125	(T_4)	225	(T_3)	325	(T_5)	425	(T_5)	525	(T_3)
131	(T_3)	231	(T_4)	331	(T_3)	431	(T_5)	531	(T_5)
132	(T_4)	232	(T_2)	332	(T_2)	432	(T_4)	532	(T_5)
133	(T_3)	233	(T_2)	333	(T_1)	433	(T_2)	533	(T_3)
134	(T_5)	234	(T_4)	334	(T_2)	434	(T_2)	534	(T_4)
135	(T_5)	235	(T_5)	335	(T_3)	435	(T_4)	535	(T_3)
141	(T_3)	241	(T_5)	341	(T_5)	441	(T_3)	541	(T_4)
142	(T_5)	242	(T_3)	342	(T_4)	442	(T_3)	542	(T_5)
143	(T_5)	243	(T_4)	343	(T_2)	443	(T_2)	543	(T_4)
144	(T_3)	244	(T_3)	344	(T_2)	444	(T_1)	544	(T_2)
145	(T_4)	245	(T_5)	345	(T_4)	445	(T_2)	545	(T_2)
151	(T_2)	251	(T_4)	351	(T_5)	451	(T_4)	551	(T_2)
152	(T_4)	252	(T_3)	352	(T_5)	452	(T_5)	552	(T_3)
153	(T_5)	253	(T_5)	353	(T_3)	453	(T_4)	553	(T_3)
154	(T_4)	254	(T_5)	354	(T_4)	454	(T_2)	554	(T_2)
155	(T_2)	255	(T_3)	355	(T_3)	455	(T_2)	555	(T_1)

は、それぞれ、5, 30, 30, 30, 30 個ずつの、計 125 個であることが分かる。(図 4.1 参照) ここに、格子上でボンドの配置は異なっても、グラフとして同一であれば同じタイプとした。この中で、ボンドの配置まで同じものがある。例えば、 T_2 タイプの 112, 121, 211 等がその例である。この重複度を除く公式が (4.2.3) 式である。タイプ T_2 に対してこれを適用すると、 $30 \div (3!/2!1!) = 10$ となり、図 4.2 に示されるように、タイプ T_2 に属するグラフが、与えられた格子上で、取り得るすべての配置の数を与えてくれる。

以上は、 $N_b^{r'}$ 個の取り得るすべての場合について、厳密に扱ったものであるが、現実には数が多すぎるため、計算不可能である。そこでモンテカルロ法を用いて、 N_b 個のボンドから無作為に q 個のボンドを復元抽出して得られたボンドの組を M_s 個サンプリングしたとすると、その時タイプ T_i の度数が ν_i^{MC} である時には、 ν_i は次のように近似できる。(表 4.2 参照)

$$\nu_i \sim N_b^q \times (\nu_i^{MC} / M_s) \quad (4.2.4)$$

4.3 クラスタ中の非零トレース率の算定 (手続き 2)

分かり易く例を引いて示そう。今、ボンド 1 が 2 本、ボンド 2 が 1 本およびボンド 3 が 3 本の計 6 本のボンドをもつクラスターを考えよう。(表 4.3(a) 参照) これを、一次元配列 BOND に $BOND(1) \leftarrow 2, BOND(2) \leftarrow 1, BOND(3) \leftarrow 3$ を格納することによって表 4.3(a) のように表現する。次に、1 本のボンドを互いに反対向きの 2 本の arrow と見なすのであったから、これを、2 つの一次元配列 HEAD と TAIL を用いて、表 4.3(b) のように表す。ボンド 1 は 4 本の arrow をもつので、 $HEAD(1) \leftarrow 1, TAIL(1) \leftarrow 2$ 、により、1 本目の arrow がサイト 1 に head をもち、サイト 2 に tail をもつことを表し、 $HEAD(2) \leftarrow 2, TAIL(2) \leftarrow 1$,

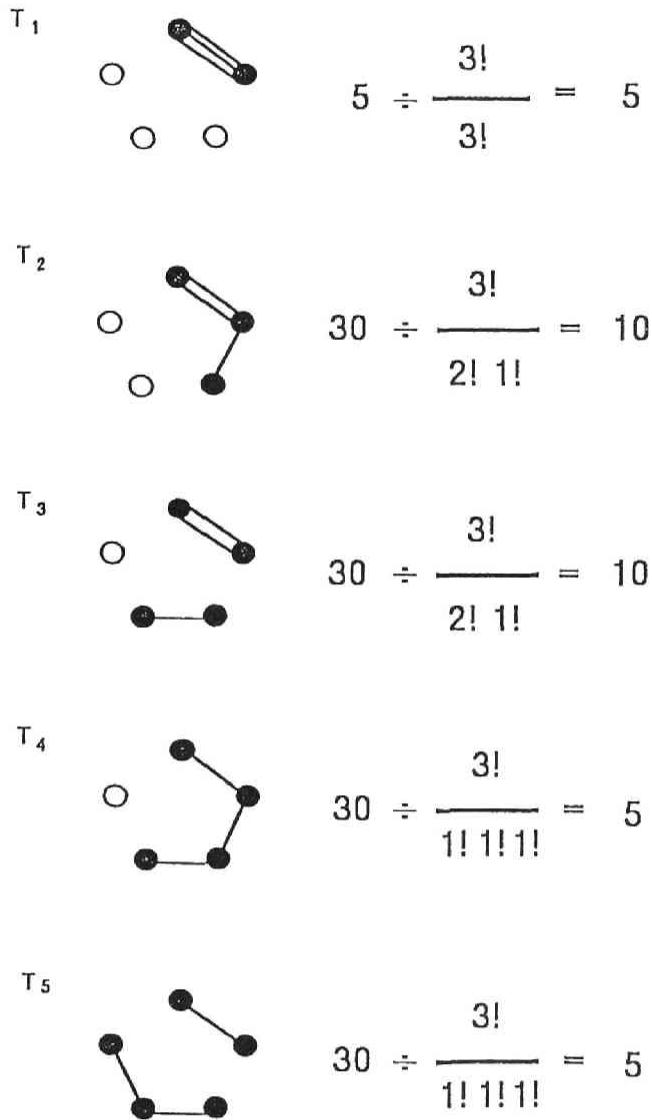


図 4.1 図 2.1(a) の格子系において $r' = 3$ 本のボンドによる取り得るすべての配置。
右端の数値は各タイプにおける同一グラフの格子上でのすべての取り得る配置の数を表す。(図 4.2 参照)

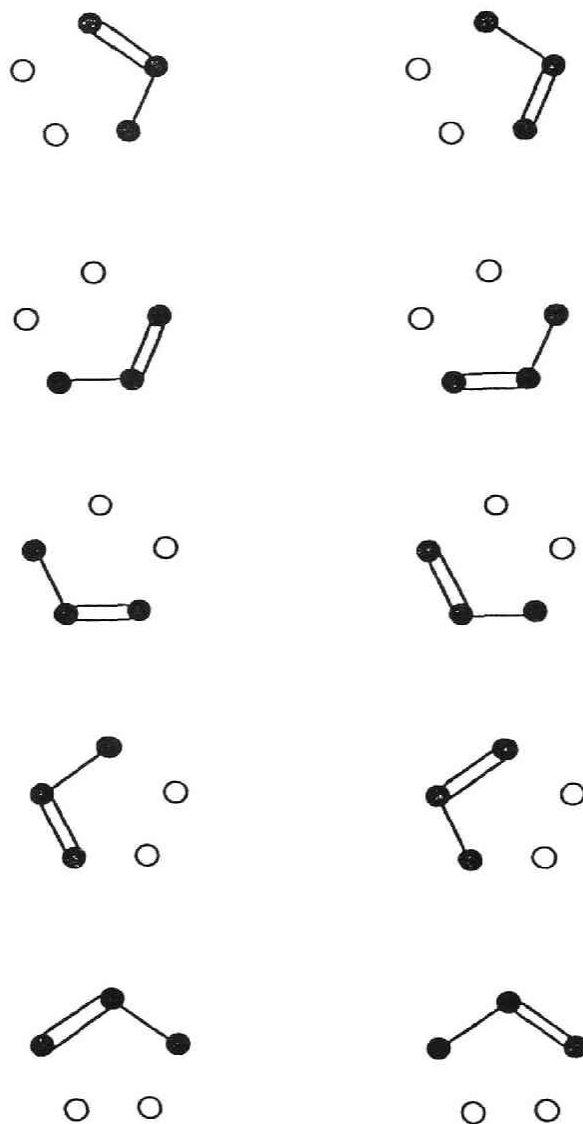


図 4.2 図 4.1 のタイプ T_2 における同一グラフが図 2.1(a) の格子系において取り得るすべて (10 通り) の配置。

表 4.2 q 個のボンドの格子上的配置によって生成されるグラフのタイプ T_i 、その度数 $\nu_i (i = 1, \dots, k)$ および (4.2.3) 式による重複度 m_i 。

型	総数	重複度	重複を除いた時の総数
T_1	ν_1	m_1	ν_1/m_1
T_2	ν_2	m_2	ν_2/m_2
T_3	ν_3	m_3	ν_3/m_3
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
T_k	ν_k	m_k	ν_k/m_k
$\sum_{i=1}^k \nu_i = N_b^q$			$\sum_{i=1}^k \nu_i/m_i$

上の厳密な関係に対するMCによる近似

型	総数	重複度	重複を除いた時の総数
T_1	ν_1^{MC}	m_1	ν_1^{MC}/m_1
T_2	ν_2^{MC}	m_2	ν_2^{MC}/m_2
T_3	ν_3^{MC}	m_3	ν_3^{MC}/m_3
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
T_k	ν_k^{MC}	m_k	ν_k^{MC}/m_k
$\sum_{i=1}^k \nu_i^{MC} = M_s$			$\sum_{i=1}^k \nu_i^{MC}/m_i$

厳密な度数 ν_i とMCによる度数は

$$\nu_i \sim N_b^q \times (\nu_i^{MC}/M_s)$$

によって近似的に関係している。

- 表 4.3 (a) 図 4.3(a) に示されたクラスターにおけるボンドの記憶。
 (b) 表 4.3(a) のボンドを arrow として記憶。
 (c) 表 4.3(b) で登録された arrow のランダム順列の一例。

	1	2	3								
BOND	2	1	3								

(a)

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12								
HEAD	1	2	1	2	2	3	3	4	3	4	3	4								
TAIL	2	1	2	1	3	2	4	3	4	3	4	3								

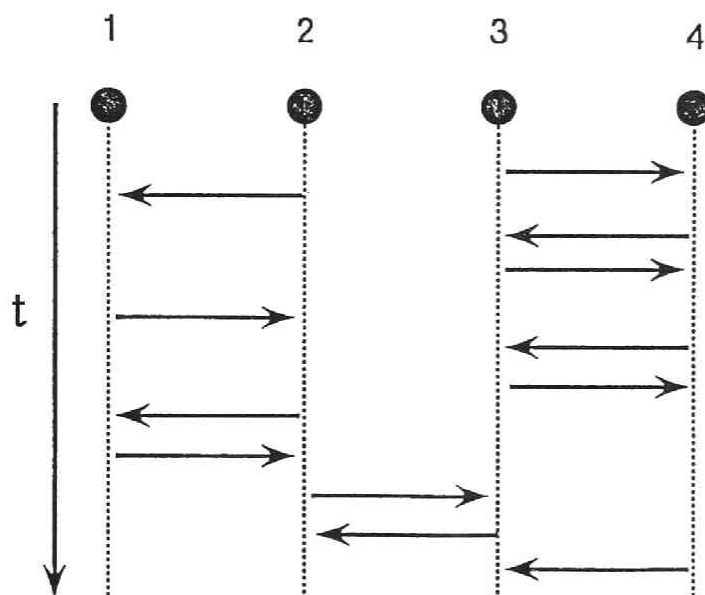
(b)

ORDER	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12								
	8	1	7	10	4	9	12	3	2	6	5	11								

(c)



(a)



(b)

図 4.3 (a) ボンド 1 が 2 本、ボンド 2 が 1 本およびボンド 3 が 3 本の計 6 本のボンドによるサイト 1, 2, 3 および 4 を含むクラスター。
(b) 表 4.3(a) に基づくクラスター (図 4.3(a) 参照) のための arrow 表示の参照表 (表 4.3 (b)) を表 4.3(c) の配列 ORDER の順序で操作する過程を示す。

により、2本目の arrow がサイト 1 に tail をもち、サイト 2 に head をもつことを表し、 $HEAD(3) \leftarrow 1, TAIL(3) \leftarrow 2$ 、により、3本目の arrow がサイト 1 に head をもち、サイト 2 に tail をもつことを表し、そして最後に、 $HEAD(4) \leftarrow 2, TAIL(4) \leftarrow 1$ 、により、4本目の arrow がサイト 1 に tail をもち、サイト 2 に head をもつことを表す。ボンド 2 および 3 に対しても、同様な手続きを行えば、結局、表 4.3(b) に示すような結果が得られる。これを、このクラスタのすべての arrow に対する参照表として用いる。次に、別の一次元配列 ORDER を用いる。先ほどの arrow は全部で 12 本あったから、1 から 12 までの整数のランダム順列を乱数を用いて生成し、この配列に格納する。その一例として表 4.3(c) を参照下さい。配列 ORDER の内容を元に、配列 HEAD および TAIL の内容を参照しながら、(2.3.29) 式中の一項を無作為に生成するのである。その手順を示そう。まず、ORDER (1) の内容をみると 8 である。つぎに、HEAD(8) と TAIL(8) をみる。すると、4 と 3 である。これはまず最初にサイト 4 に head、サイト 3 に tail をもつ arrow を選んだことになる。今度は、ORDER(2) の内容をみると 1 である。HEAD(1) と TAIL(1) をみる。1 と 2 である。2本目の arrow は、サイト 1 に head、サイト 2 に tail を持つことが分かる。以下同様に計 12 回繰り返せば、結局、演算子

$$S_4^+ S_3^- S_1^+ S_2^- S_3^+ S_4^- S_4^+ S_3^- S_2^+ S_3^- S_3^+ S_4^- S_4^+ S_3^- S_1^+ S_2^- S_2^+ S_1^- S_3^+ S_2^- S_2^+ S_3^- S_3^+ S_4^-$$

を無作為に抽出したことになる。これを、図式的に書いたものが図 4.3(b) に示されている。同一サイト上ではこれらの演算子は可換ではないので、その順序は重要である。演算子を左から右に走査することは、この図においては、上から下に見ていくことに対応している。したがって、上から下に見ていくと、最初はサイト 4 に head、サイト 3 に tail をもつ arrow がきており、2本目は、サイ

ト 1 に head、サイト 2 に tail がきている。以下同様にして、最後は、サイト 3 に head、サイト 4 に tail がきて終わっている。ここで、head はそのサイト上のスピンを down から up へ反転させる働きをし、tail は up から down へ反転させる働きをする。したがって、今の例で非零トレース値に寄与する可能なスピン状態は、 $| - + + - \rangle$ の時のみである。コンピュータプログラム上では、この演算子を生成するのと条件 2 を満たしてしているかをチェックするのと同様に行える。以下に、その手順を示そう。今、変数 PLUS, MINUS, UNUSED の内容が、それぞれ、1, -1, 0 になるように、定数として宣言するか、代入文で格納するものとする。一次元配列 CHECK に初期設定

$$\text{CHECK}(i) \leftarrow \text{UNUSED} \quad (i = 1, \dots, v)$$

を行う。ただし、 v は現クラスターのサイト数である。この配列に対して、前述の演算子の生成法を適用しながら、現在の arrow の head と tail がきている両サイトの番号と同一の添え字をもつ配列 CHECK の内容が、head に対しては PLUS、tail に対しては MINUS になっているか確認する。UNUSED の場合はどちらでも可能である。もし一致していなければ、その時点で条件 2 が満たされなかったことが判明する。一致した場合は、配列 CHECK において、確認の際アクセスした 2 箇所の内容を、PLUS なら MINUS に、MINUS なら PLUS に反転させて、条件 2 を満たすために次回に来るべきのものが head か tail かを指定するようにする。UNUSED の場合は、現在の arrow に基づいて、PLUS か MINUS を代入する。(図 4.4 参照)

以上を、アルゴリズムとして示す。

- (1) 配列 BOND に、与えられたクラスターのボンド情報を格納する。(表 4.3(a) 参照)

CHECK					CHECK				
	1	2	3	4		1	2	3	4
1	*	*	*	*	1			+	-
2	*	*	+	-	2	-	+		
3		+	+		3			-	+
4	-	+	-	+	4			+	-
5	-	+	+	-	5	+	-		
6	+	-	+		6			-	+
7	+	-	-	+	7			+	-
8	+	-	+	-	8		+		
9	-	+	+	-	9	+	-		
10	+	-	+	-	10		+	-	
11	+	+	-	-	11		-	+	
12	+	+	+		12			-	+

実行前

実行後

+ : PLUS
 - : MINUS
 * : UNUSED

図 4.4 条件 2 をチェックするための一次元配列 CHECK のステップ毎の状態。

各ステップにおいてチェックの結果、条件 2 が満たされた時は、実行後と記してある表のように現時点でチェックした arrow に従って + と - を反転させる。

ステップ 1 および 2 においては * が示す通り未使用であったからチェックされた arrow の head と tail により + と - を逆転させて記帳する。

図 4.3(b) の操作と対応させて読み取ると分かり易い。

(2) 2つの配列 HEAD と TAIL に、配列 BOND の情報を基にして、現在のクラスターのための arrow を登録し、参照表を作成する。(表 4.3(b) を参照)

(3) NZTR \leftarrow 0, ZRTR \leftarrow 0 にセットし、ステップ 2 で登録された arrow によるランダム順列を無作為に復元抽出する回数を指定する。

その回数だけステップ 4 から 7 までを繰り返す。

(4) 配列 ORDER に 1 から l までの整数のランダム順列を生成する。

ただし、 l はステップ 2 で登録された arrow の総数である。

(5) 配列 CHECK を $CHECK(i) \leftarrow UNUSED(i = 1, \dots, v)$ に初期化する。

ただし、 v は現クラスターのサイト数である。

(6) 以下を、 $i = 1, \dots, l$ に対して繰り返す。

$j \leftarrow ORDER(i), j_1 \leftarrow HEAD(j), j_2 \leftarrow TAIL(j)$

もし、 $(CHECK(j_1) = MINUS \text{ かまたは } UNUSED)$

かつ $(CHECK(j_2) = PLUS \text{ かまたは } UNUSED)$ のとき

$CHECK(j_1) \leftarrow PLUS, CHECK(j_2) \leftarrow MINUS$

それ以外のとき ZRTR \leftarrow ZRTR + 1, ステップ 4 へ。

(7) NZTR \leftarrow NZTR + 1, ステップ 4 へ。

(8) $W \leftarrow NZTR / (NZTR + ZRTR)$

W を各 arrow の重複度で割っておく。

この arrow の重複度について説明しよう。いま、与えられたクラスターがボンド b_1 を q_1 本、ボンド b_2 を q_2 本、 \dots 、ボンド b_p を q_p 本から成っているとする。度々、断っているが、1本のボンドを2本の arrow と見なすので、このクラスターの重複度は

$$\frac{(2q_1 + 2q_2 + \dots + 2q_p)!}{q_1!q_1!q_2!q_2!\dots q_p!q_p!} \quad (4.3.1)$$

で与えられる。この重複度は、同一サイト対での同種の arrow は識別できないことから生じてくる。

断っておくが、この手続きで得られた重みは系の次元によらず、また、格子構造にもよらず、とにかくクラスターのグラフとして同一であれば使用可能であるから、相異なるクラスターに対して一回だけ評価すればよい。この事実により、展開係数の評価のための全体としての計算量を著しく減すことができるので大変有効である。しかしながらこの手続きは、本方法において実行されるどの手続きより、圧倒的に計算時間を要するものである、更にアルゴリズムを改良することは望ましいことである。

4.4 トレースの評価（手続き 3）

手続き 1 のステップ 2 で抽出された $r' (= r/2)$ 個のボンドによって生成された一つのグラフを G とする。このグラフ G は p 個の独立なクラスター c_1, c_2, \dots, c_p から成っていて、それぞれ、 q_1, q_2, \dots, q_p 本のボンドを持っているとする。この時、クラスター c_i の非零トレース率は

$$w_i = \left[\frac{\text{サンプル中の非零トレースを与えるものの個数(NZTR)}}{\text{サンプル数(NZTR + ZRTR)}} \right]_{c_i}, (i = 1, \dots, p) \quad (4.4.1)$$

で与えられる。ただし、ここでのサンプルとは手続き 2 のステップ 6 で指定された反復回数だけ生成されるランダム順列に基づいた arrow の列による演算子を意味する。更に、arrow についての重複度（(4.3.1) 式を参照）を考慮すると、

$$\begin{aligned} v_i &= \frac{(2q_i)!}{m_i} w_i, \\ q_i &= q_{i_1} + q_{i_2} + \dots + q_{i_k}, \\ m_i &= (q_{i_1}!)^2 (q_{i_2}!)^2 \dots (q_{i_k}!)^2 \end{aligned} \quad (4.4.2)$$

である。ただし、 v_i は arrow についての重複度も考慮した時の、クラスター c_i における非零トレース率であり、 q_i はクラスター c_i でのボンドの総数、 q_{ij} はクラスター c_i に含まれている最近接対ボンド b_j の本数を表す。

グラフ理論の定理 [17,18] によれば、グラフ G についてのトレースに対する重み V は、各独立なクラスターに対する部分トレースに対する重み v_i を用いて、次のように表せる。

$$\begin{aligned}
 V &= \frac{(2q_1 + 2q_2 + \cdots + 2q_p)!}{(2q_1)!(2q_2)!\cdots(2q_p)!} v_1 v_2 \cdots v_p \\
 &= \frac{r!}{(2q_1)!(2q_2)!\cdots(2q_p)!} \frac{(2q_1)!}{m_1} w_1 \frac{(2q_2)!}{m_2} w_2 \cdots \frac{(2q_p)!}{m_p} w_p \\
 &= r! \prod_{i=1}^p \frac{w_i}{m_i} \tag{4.4.3}
 \end{aligned}$$

ここに各 q_i ($i = 1, \dots, p$) が2倍されているのは、一本のボンドが2本の arrow に対応しているためである。求めるトレース T は、

$$T \equiv V \times 2^s / M \tag{4.4.4}$$

で与えられる。ただし、 V は上記の通りであり、 M は (4.2.3) 式で与えられる。こうして求めた M_s 個のトレース値の平均をとったものが、(4.1.1) 式の展開係数のMC値を与える。具体的には、

$$\bar{a}_r = N_b^{r/2} \cdot (M_s \text{個のサンプルに対する(4.4.4)式によるトレース値の和}) / M_s \tag{4.4.5}$$

で与えられる。ただし、因子 $N_b^{r/2}$ は (4.2.4) 式に起因するものである。

第5章 展開項の計算法

5.1 序文

第3章および第4章において、展開係数を評価するための方法を詳しく述べた。しかしながら、この方法では N が少し大きくなっても最初の数百項を評価することでさえ大変な計算時間を要する。そこで、次の段階として、 r_M より小さな r の残りの展開係数が内挿によって評価される。展開係数の対数 (y_r と記す。) が展開項の番号 r (x_r と記す。) の単調関数となることを経験的に見つけ出すことができた。そこで、 r_M 以下の任意の r に対して展開係数を評価するための内挿公式として、有理関数

$$y_r = \frac{\beta_0 + \beta_1 x_r + \beta_2 x_r^2 + \cdots + \beta_m x_r^m}{\alpha_0 + \alpha_1 x_r + \alpha_2 x_r^2 + \cdots + \alpha_n x_r^n}, \quad (5.1.1)$$

を仮定することにする。ただし、 $\alpha_0 = 1$ および $m + n + 1 = M$ である。 M 個の定数 α_1, \dots, β_m は次の斉一次方程式を数值的に解くことにより決定される。

$$\sum_{i=0}^m \beta_i x_{r_k}^i - y_{r_k} \sum_{i=0}^n \alpha_i x_{r_k}^i = 0, \quad k = 1, 2, \dots, M. \quad (5.1.2)$$

とにかく、この内挿公式は大変強力である。なぜならば、僅か 10 個にも満たない係数で、幾 10 万もの内挿された展開係数を求めるのに十分であるからである。これによって非常に計算時間を節約することができる。次節では各模型に対する内挿公式 (5.1.1) の適用法と実行上の留意点について述べることにする。一方、展開項を計算し、更に熱力学的諸量を評価するとき、スピン・サイズ N が大きい

系でしかもかなり低温における状態を調べようとする、コンピュータ・プログラムにおける浮動小数点数に対するどの既存のデータ型によっても表示できないような大きな数が出てくる。第 5.3 節では、その解決策を考案したのでそれについて述べることにする。

5.2 展開係数の内挿法

内挿を行う際、ハイゼンベルク模型と XY 模型とでは細かい点で違いがあるので、両者を分けて扱うことにする。次の項 5.2.1 では、ハイゼンベルク模型について述べ、第 5.2.2 項では、XY 模型について述べることにする。

5.2.1 ハイゼンベルク模型のための内挿法

ハイゼンベルク模型に対しては、 $N = 10, 20$ および 30 に対する初項から数 10 項までのすべての係数 \overline{A}_r を計算して $\ln \overline{A}_r/N$ を r/N の関数としてグラフにプロットした曲線に、内挿式 (5.1.1) を用いて得られた曲線が正確に当てはまることが分かった[29,30]。 \overline{D}_r に対しても同様であった。そこで、内挿公式 (5.1.1) において、 y_r を $\log A_r/N$ (\overline{D}_r に対しても同様に、) に、そして、 x_r を r/N に選んだときのものを採用することにした。

さて、この内挿法を用いて熱力学的諸量の正確な値を得るための留意点について述べることにする。具体例については第 6 章を参照いただきたい。与えられた τ に対して、 $a_r \tau^{-r}/r!$ の中で、最大値を与える項を第 r_{Max} 項としよう。一次元においては、 $N = 10, 20, 30$ 、および 128 、そして二次元では $N = 10 \times 10, 20 \times 20$ 、および 30×30 の系に対して、 r_{Max} を、いろいろな τ に対して調べてみたところ、次のような結果を得た。つまり、大雑把に言って、 r_{Max} は τ が 1 より大きい温度領域では $N_b/2\tau$ で、1 より小さな温度領域に対しては N_b/τ で与え

られるということである。この事実から、 τ^* より高い温度における有限系の熱力学的諸量の正確な値を与えるためには、 τ_M は N_b/τ^* より大きくなるように選ばなければならない。 τ_M に対するもう一つのチェックは、 \overline{A}_{τ_M} が、どの程度に $N+1$ ($\equiv A_\infty$) (文献 30 の Appendix 参照) に近い値になっているかを調べることである。一方、 A_1 は厳密値 2^{N-1} で与えられる。以上から、 A_1 および \overline{A}_{τ_M} は、常に内挿点として含められる。残り $M-2$ 個の内挿点の取り方には、かなり任意性がある。しかし M を大きく取りすぎると、内挿関数が単調とはならずかえって具合が悪くなるようである。経験的には、 M は 7 前後がよいようである。ところで、熱力学的諸量を評価する時、 τ の値が小さくなる、つまり温度が下がるにつれて、より高次の項が必要になってくる。また、与えられた τ によって分配関数に重要な寄与をする項が変わってくる。僅か 10 個足らずの内挿点によって多くは数 10 万項もの展開係数を近似するのであるから、全温度領域に合うような内挿点の取り方は難しい。したがって、 $\tau > 1$ に対するものと、 $\tau \leq 1$ に対するものの、2 組に分けて内挿した方がよい。また、低温領域まで正確な熱力学的諸量を評価するには、非常に多くの係数を評価する必要があるので、得られた係数を保管するために多量の磁気ディスク領域を必要とする。使用されるディスク領域を節約するためには、出力ファイルは少なくとも UNFORMATTED で保管した方がよい。

5.2.2 XY 模型のための内挿法

XY 模型に対しても、前節のハイゼンベルク模型で得た知識を生かして、展開係数の対数を展開項の番号の関数とみて注意深く調べてみると、次のような結果が得られる [32]。つまり、内挿点として用いようとしているいくつかの展開係数において、 $\log \overline{a}_\tau$ を τ の関数として、プロットしてみると、単調に増加してい

ることが分かった。本模型に対しては、 y_r を $\log \bar{a}_r$ に、 x_r を r に取ることにし、(5.1.1) 式を、次の形で用いることにした。つまり、

$$y_{r_i} (\equiv \log \bar{a}_{r_i}) = \frac{\mu_1 r_i^3 + \mu_2 r_i^2 + \mu_3 r_i + \mu_4}{r_i^2 + \mu_5 r_i + \mu_6}, \quad (i = 0, 1, \dots, 5) \quad (5.2.1)$$

ここで、 $r_0 = 0$ に取れば、 \bar{a}_0 は厳密値 $a_0 = 2^N$ で与えられるので、モンテカルロ法で評価するのは、 $\bar{a}_{r_1}, \dots, \bar{a}_{r_5}$ の 5 つの展開係数でよい。しかしながら、内挿データとして採取できるものは、本方法では $r \sim N$ 程度の \bar{a}_r までに限られている。なぜならば、 $r > N$ に対しては、 \bar{a}_r に零の寄与をするものが圧倒的に多くなってくるので、合理的な値を得るためにはすぐに実行不可能な計算量を要求されることになる。そこで r_M より高次の展開係数を求めるのにも内挿で用いた (5.2.1) 式を形式的に今度は引き続き外挿式として用いることにする。外挿値の精度を確認するには Katsuda [32] による判定法を用いればよい。それを簡単に説明する。ハミルトニアン \mathcal{H} の絶対値最大の固有値を λ_{Max} とする。このとき $r \rightarrow \infty$ に対して $Tr\{\mathcal{H}^r\} \rightarrow (\lambda_{Max})^r$ となる。また、 $a_r \equiv (-1/J)^r Tr\{\mathcal{H}^r\}$ であるから、 $a_r/a_{r-2} \sim (\lambda_{Max}/J)^2$ を得る。一方、 $r \rightarrow 0$ において $Z \sim \exp(-\lambda_{Max}/\tau)$ であるから、(2.4.2) 式より $E \sim -\lambda_{Max}$ を得る。これと上述の結果から $E/NJ \sim -\sqrt{a_r/a_{r-2}}/N$ が導き出せる。ところで、(5.2.1) 式において、 $r \gg 1$ のとき

$$y_r \sim \mu_1 r + \mu_2 \quad (5.2.2)$$

となる。したがって、 r が十分大きなところでは、

$$\bar{a}_r \sim \exp(\mu_1 r + \mu_2) \quad (5.2.3)$$

が、成り立つ。これによって $\bar{a}_r/\bar{a}_{r-2} \sim e^{2\mu_1}$ となるから、 $E/NJ \sim -e^{\mu_1}/N$ を得る。したがって、 $-e^{\mu_1}/N$ の値がどれだけ零点エネルギーに近いかを判定すれ

ばよい。なぜならば、 μ_1 は (5.2.1) 式における未定係数であり内挿データによってのみ与えられるものであるからである。実際に内挿を行ってみると、この判定に合格するには、内挿データの数値的精度もさることながら、内挿点間の間隔の取り方に非常に敏感に依存するのでかなりの注意が必要である。このことについては、今後続けて解析していく必要がある。また、具体例については第 7 章を参照いただきたい。

5.3 展開項の計算

大きなシステム・サイズに対して非常に高次の項までの内挿された係数を用いれば、熱力学的諸量が比較的低い温度までかなり正確に評価できる。熱力学的諸量は (2.4.1) から (2.4.6) までの式を用いることによって得られる。正確な量を得るためには、 τ が低くなればなるほど、より多くの係数が必要となってくる。つまり、 τ がより大きくなっていくのである。(2.2.3) 式や (2.3.11) 式に見られる通り、小さな τ で、かつ大きな τ に対して、 $a_r \tau^{-r} / r!$ の値は既存の浮動小数点表示によるデータ型では表せなくなってくる。この困難を克服するために、次のようなデータ型のインプリメンテーション [41] を導入し、文献 31 の結果や第 7 章結果を得る際に用いた。つまり、REAL 型の変数（言うなれば、AM）が仮数のために用いられ、INTEGER 型の変数（言うなれば、AE）が指数のために用いられる。零以外は仮数の最上位の桁の数字は 0 でないものとし、小数点はその仮数の最左端にあるものとして定義する。常用対数を用いてこの形に変換する際の指数の超過分は指数部用の変数 AE に加えられる。例えば、数 $295.1696 \cdot 10^{17151}$ は $AM \leftarrow 0.2951696$, $AE \leftarrow 17154$ となる。この型によって、10 進浮動小数点数として $-2,147,483,648$ から $2,147,483,6487$ までの範囲の

指数をもつ数が大抵のマシーンで取り扱うことができるようになった。そのインプリメンテーションをプログラムリスト 2 として付録に掲載するので参照いただきたい。最近、このインプリメンテーションと類似した方法が O. Portilho [42] によってわれわれとは独立に公表された。

第6章 ハイゼンベルク模型への応用

6.1 一次元環状格子強磁性体への応用

(3.1.1a) 式で与えられるMC値 \overline{A}_r は、サンプル回数が増えるにつれてどのような収束性を示すのかを調べるために、 $N = 30$ に対して、 \overline{A}_r を N_r の関数としていくつかをプロットしたものを、図 6.1 に示す。 $N_r > 5 \cdot 10^6$ に対して、相対誤差は 0.2 から 0.5% 程度である。熱力学的諸量はこのような誤差を含んだ多くの項の和によって与えられているが、確率論にしたがえば、熱力学的諸量における相対誤差は個々の項の誤差よりはるかに小さくなる。図 6.2 は、第5章で述べた内挿法を用いて得られた内挿値 \overline{A}_r を用いて、 r/N の関数としての $\ln \overline{A}_r / N$ の値を示している。内挿点として用いた項 r が、表 6.1 に掲げられている。ただし、括弧内の数字はサンプル回数である。 $N = 128$ の2つの場合に対して、ケース (a) は各熱力学的諸量を計算するのに用いられ、ケース (b) は後述の展開係数の極限值、零点エントロピーおよび零点エネルギーへの収束性をチェックするためにのみ適用される。内挿値 \overline{A}_r の精度は、モンテカルロ法によって直接評価された \overline{A}_r の精度に匹敵する。 $\ln \overline{A}_r / N$ は N によらず、 $r = 0$ では値 $\ln 2$ をとり、零点エントロピーに対応する値 $\ln(N+1)/N$ に近づく。表 6.2 は、 $r/N = 100$ における \overline{A}_r の値に加えて、 $N = 128$ に対する $r/N = 2000$ におけるものの値も与えている。この表の値は与えられたスピン・サイズに対して温度零度に近づくにはどれ位の展開項が要求されるかについての情報を与えて

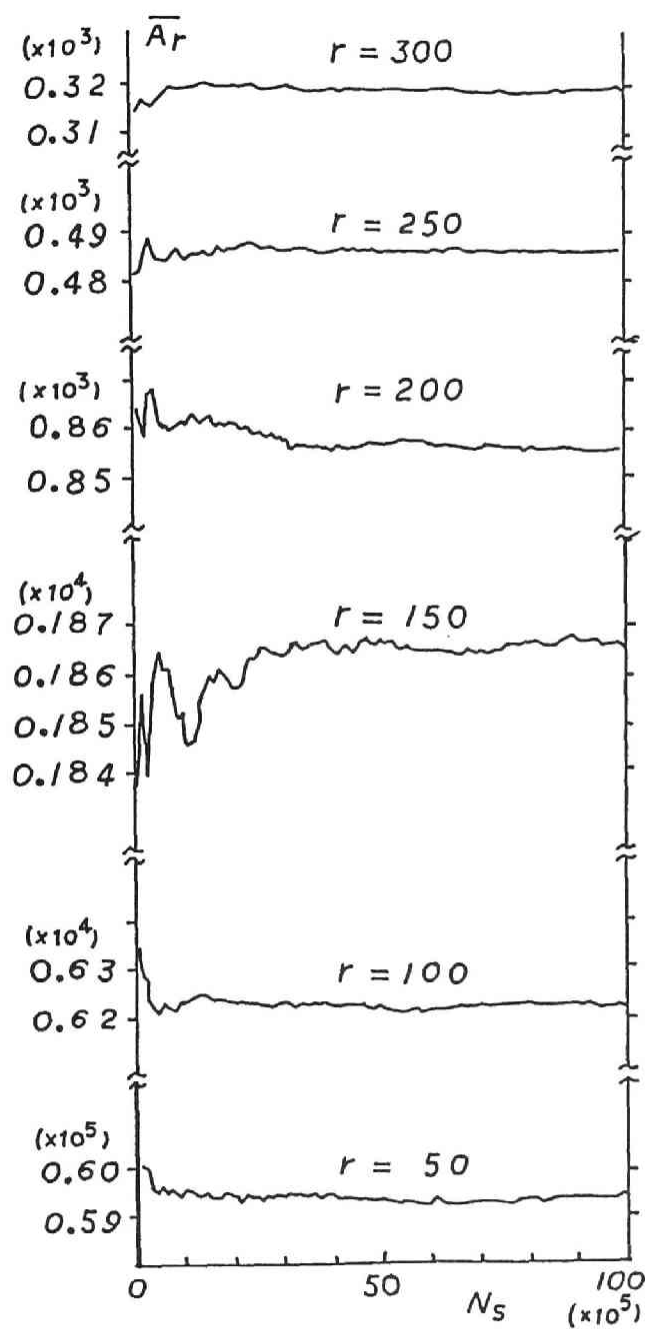


図 6.1 $N = 30$ に対するサンプル数 N_s の関数としての平均値 \bar{A}_r 。

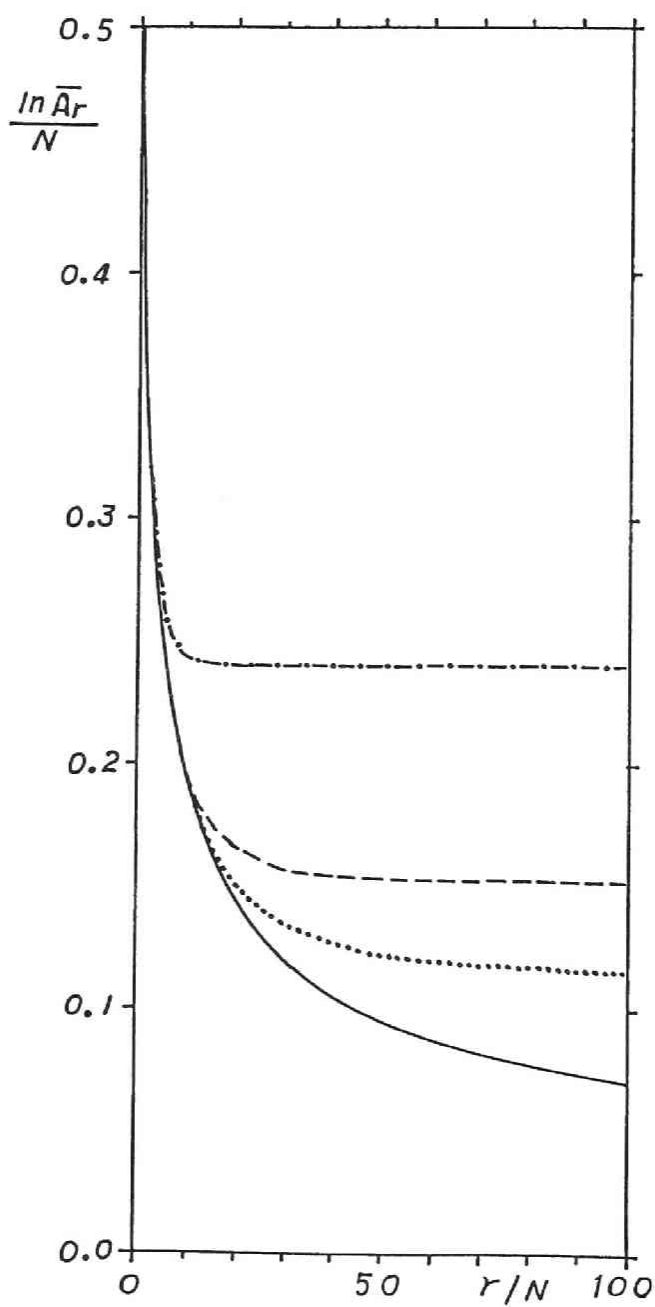


図 6.2 $\ln \bar{A}_r / N$ が $N = 10$ (— · — · —), 20 (— — —), 30 (· · ·) および 128 (—) に対して r/N の関数として示されている。曲線を指定する線種は以下の図においても同じく用いる。

表 6.1 スピンサイズ $N = 10, 20, 30$ および 128 に対して内挿点として用いられた項。

ただし、括弧内の数字はサンプル数 N_s を表す。

$N = 128$ の 2 つのケース (a) および (b) については本文参照。

N	10	20	30
τ	1 (exact)	1 (exact)	1 (exact)
	9 (10^6)	10 (10^7)	10 (10^7)
	25 (10^6)	50 (10^7)	50 (10^7)
	71 (10^6)	150 (10^7)	100 (10^7)
	150 (10^7)	300 (10^7)	150 (10^7)
	200 (10^7)	500 (10^7)	300 (10^7)
	300 (10^7)	1000 (10^6)	500 (10^7)
	500 (10^6)	1500 (10^6)	2001 (10^6)
	2000 (10^6)	3000 ($2 \cdot 10^7$)	6000 (10^6)

N	128(a)	128(b)
τ	1 (exact)	1 (exact)
	5 (10^6)	10 (10^6)
	20 (10^6)	50 ($2 \cdot 10^6$)
	75 ($5 \cdot 10^6$)	128 ($7 \cdot 10^6$)
	128 ($7 \cdot 10^6$)	640 ($6 \cdot 10^6$)
	640 ($6 \cdot 10^6$)	1280 ($7 \cdot 10^3$)
	1280 ($7 \cdot 10^6$)	3840 ($2 \cdot 10^3$)
	3840 ($2 \cdot 10^6$)	12800 (10^5)
	12800 (10^5)	256000 ($5 \cdot 10^3$)

表 6.2 各スピンサイズに対する τ , \bar{A}_τ および極限值 A_∞ の値。

N	τ	\bar{A}_τ	A_∞
10	1000	11.0001	11
20	2000	21.0206	21
30	3000	31.7175	31
128	12800	8598.1593	129
128	256000	140.1760	129

くれる。 $N = 128$ の場合には、 $r = 12,800$ での \overline{A}_r の値は $A_\infty (= 129)$ の値にはほど遠いけれども、僅か $5 \cdot 10^3$ 個の N_r であっても $r = 256,000$ では 140.176 をえている。このことは本方法を正当付けるものである。さて、 $N = 10$ に対する厳密な数値計算によってえられた熱力学的諸量 [29] とわれわれの結果とを比較することにより本方法の正確さを詳細に調べることにしよう。表 6.3 は内挿のために用いられた展開係数 \overline{A}_r と \overline{D}_r の値を示している。 \overline{A}_r は $r = 200$ で極限值 $A_\infty (= 11)$ にほぼ収束している。 $r \geq 300$ に対して一寸小さな値になっているのはモンテカルロ法の統計的な誤差によるものである。 $r = 2000$ までの展開項を取り込んで得られた熱力学的諸量が表 6.4 にまとめられている。括弧内の数字は厳密な計算によって与えられた値である。比熱を除けば、厳密計算と極めてよい一致を示している。比熱の一致がよくないのは、内部エネルギーの温度微分で与えられる (2.4.3) 式において桁落ちをおこすためである。僅か 9 個の展開係数によって、これらの熱力学的諸量が導き出されることに再び注目いただきたい。この 9 個の係数は、より低い温度に対して一致をよくするように選ばれているので、 $k_B T/J \approx 1.0$ より高い温度ではあまり一致がよくない。高温側で一致をよくしようと思えば、そのような展開係数の取り方に改めればよい。表 6.5 は、 $N = 10, 20$ および 30 という、小さなスピンの系に対して、零点エントロピー ($(1/N) \ln(N+1)$) および零点エネルギー (-0.5) にどれ位正確に近づいているかを示している。最後の欄は、熱力学的諸量を計算する際に取り込まれた展開項の数を表している。これは表 6.2 と共に、関連の温度に対して必要とされる展開項の数に関する情報を与える。エントロピー、内部エネルギー、比熱および帯磁率の温度依存性が $N = 10, 20, 30$ および 128 に対して図 6.3 ~ 6.6 に示される。特に、 $N = 128$ に対しては、これらの熱力学的諸量の数値が、 $k_B T/J = 1.00$ から 0.02 までの温度に対して表 6.6 に示されている。これらの

表 6.3 内挿に用いられた $N = 10$ の展開係数の値。

r	N_s	\bar{A}_r	\bar{D}_r
1	exact	512.000000	6144.000000
9	10^6	75.399512	1430.038344
25	10^6	24.904694	710.895544
71	10^6	12.305882	472.517800
150	10^7	11.054856	441.430312
200	10^7	11.002578	440.112954
300	10^7	10.996298	439.935792
500	10^6	10.992076	439.763856
2000	10^6	10.992055	439.935091

表 6.5 異なるスピン・サイズに対して本方法によってえられた最低温でのエントロピーと内部エネルギーの値。

右端の欄は熱力学的諸量を計算する際に取り込まれた展開項を示す。

N	$k_B T/J$	S/Nk_B	zero-point entropy	$-E/NJ$	the used terms
10	0.040	0.23980	0.2397895	0.50000	0 ~ 2000
20	0.010	0.15233	0.1522261	0.50000	0 ~ 3000
30	0.006	0.11442	0.1144662	0.50000	0 ~ 6000
128	0.020	0.13689	0.0379673	0.49916	0 ~ 12800
128	0.003	0.05924	0.0379673	0.49996	0 ~ 50000

表 6.4 10 スピン系に対する熱力学的諸量。

$r = 2,000$ までの展開項が取り込まれた。

括弧内の数字は厳密値 [33] である。

$k_B T/J$	S/Nk_B	$-E/NJ$	C_H/Nk_B	$k_B T\chi_0/N\mu^2$
1.00	0.56370 (0.55874)	0.37107 (0.37678)	$1.3960 \cdot 10^{-1}$ ($1.2969 \cdot 10^{-1}$)	1.8602 (1.8685)
0.90	0.54917 (0.54491)	0.38486 (0.38861)	$1.4098 \cdot 10^{-1}$ ($1.3270 \cdot 10^{-1}$)	1.9462 (1.9484)
0.80	0.53223 (0.52913)	0.39924 (0.40200)	$1.4638 \cdot 10^{-1}$ ($1.3509 \cdot 10^{-1}$)	2.0496 (2.0450)
0.70	0.51240 (0.51095)	0.41408 (0.41561)	$1.5015 \cdot 10^{-1}$ ($1.3713 \cdot 10^{-1}$)	2.1757 (2.1647)
0.60	0.48911 (0.48964)	0.42919 (0.42943)	$1.5166 \cdot 10^{-1}$ ($1.3945 \cdot 10^{-1}$)	2.3322 (2.3166)
0.50	0.46152 (0.46390)	0.44432 (0.44355)	$1.5051 \cdot 10^{-1}$ ($1.4305 \cdot 10^{-1}$)	2.5305 (2.5153)
0.40	0.42830 (0.43138)	0.45921 (0.45811)	$1.4710 \cdot 10^{-1}$ ($1.4846 \cdot 10^{-1}$)	2.7881 (2.7819)
0.30	0.38658 (0.38794)	0.47373 (0.47320)	$1.4325 \cdot 10^{-1}$ ($1.5229 \cdot 10^{-1}$)	3.1305 (3.1407)
0.20	0.32969 (0.32825)	0.48778 (0.48797)	$1.3518 \cdot 10^{-1}$ ($1.3723 \cdot 10^{-1}$)	3.5692 (3.5838)
0.10	0.25834 (0.25821)	0.49853 (0.49853)	$5.5886 \cdot 10^{-2}$ ($5.8702 \cdot 10^{-2}$)	3.9467 (3.9476)
0.09	0.25285 (0.25270)	0.49905 (0.49906)	$4.5576 \cdot 10^{-2}$ ($4.6072 \cdot 10^{-2}$)	3.9653 (3.9659)
0.08	0.24826 (0.24804)	0.49944 (0.49946)	$3.2831 \cdot 10^{-2}$ ($3.3430 \cdot 10^{-2}$)	3.9765 (3.9798)
0.07	0.24467 (0.24440)	0.49971 (0.49973)	$2.1474 \cdot 10^{-2}$ ($2.1594 \cdot 10^{-2}$)	3.9897 (3.9892)
0.06	0.24212 (0.24189)	0.49988 (0.49989)	$1.2235 \cdot 10^{-2}$ ($1.1634 \cdot 10^{-3}$)	3.9963 (3.9947)
0.05	0.24055 (0.24047)	0.49996 (0.49997)	$5.5805 \cdot 10^{-3}$ ($4.6351 \cdot 10^{-3}$)	3.9999 (3.9972)
0.04	0.23982 (0.23991)	0.50000 (0.50000)	$1.5721 \cdot 10^{-3}$ ($1.0661 \cdot 10^{-3}$)	4.0012 (3.9976)

表 6.6 128 スピン系に対する熱力学的諸量。
 $r = 12,800$ 項までの展開項が取り込まれている。

$k_B T/J$	S/Nk_B	$-E/NJ$	C_H/Nk_B	$k_B T\chi_0/N\mu^2$
1.00	0.55935	0.37488	$1.2885 \cdot 10^{-1}$	1.8716
0.90	0.54559	0.38794	$1.3217 \cdot 10^{-1}$	1.9535
0.80	0.52987	0.40129	$1.3467 \cdot 10^{-1}$	2.0528
0.70	0.51177	0.41484	$1.3613 \cdot 10^{-1}$	2.1764
0.60	0.49076	0.42847	$1.3630 \cdot 10^{-1}$	2.3348
0.50	0.46601	0.44205	$1.3493 \cdot 10^{-1}$	2.5466
0.40	0.43623	0.45540	$1.3182 \cdot 10^{-1}$	2.8469
0.30	0.39901	0.46835	$1.2683 \cdot 10^{-1}$	3.1341
0.20	0.34907	0.48069	$1.1952 \cdot 10^{-1}$	4.1728
0.10	0.27092	0.49204	$1.0524 \cdot 10^{-1}$	6.5356
0.09	0.25997	0.49308	$1.0262 \cdot 10^{-1}$	7.0493
0.08	0.24806	0.49410	$9.9537 \cdot 10^{-2}$	7.6910
0.07	0.23501	0.49507	$9.5881 \cdot 10^{-2}$	8.5155
0.06	0.22057	0.49601	$9.1511 \cdot 10^{-2}$	9.6144
0.05	0.20436	0.49690	$8.6247 \cdot 10^{-2}$	$1.1143 \cdot 10^1$
0.04	0.18583	0.49773	$7.9861 \cdot 10^{-2}$	$1.3393 \cdot 10^1$
0.03	0.16400	0.49849	$7.2009 \cdot 10^{-2}$	$1.6934 \cdot 10^1$
0.02	0.13689	0.49916	$6.1897 \cdot 10^{-2}$	$2.2934 \cdot 10^1$

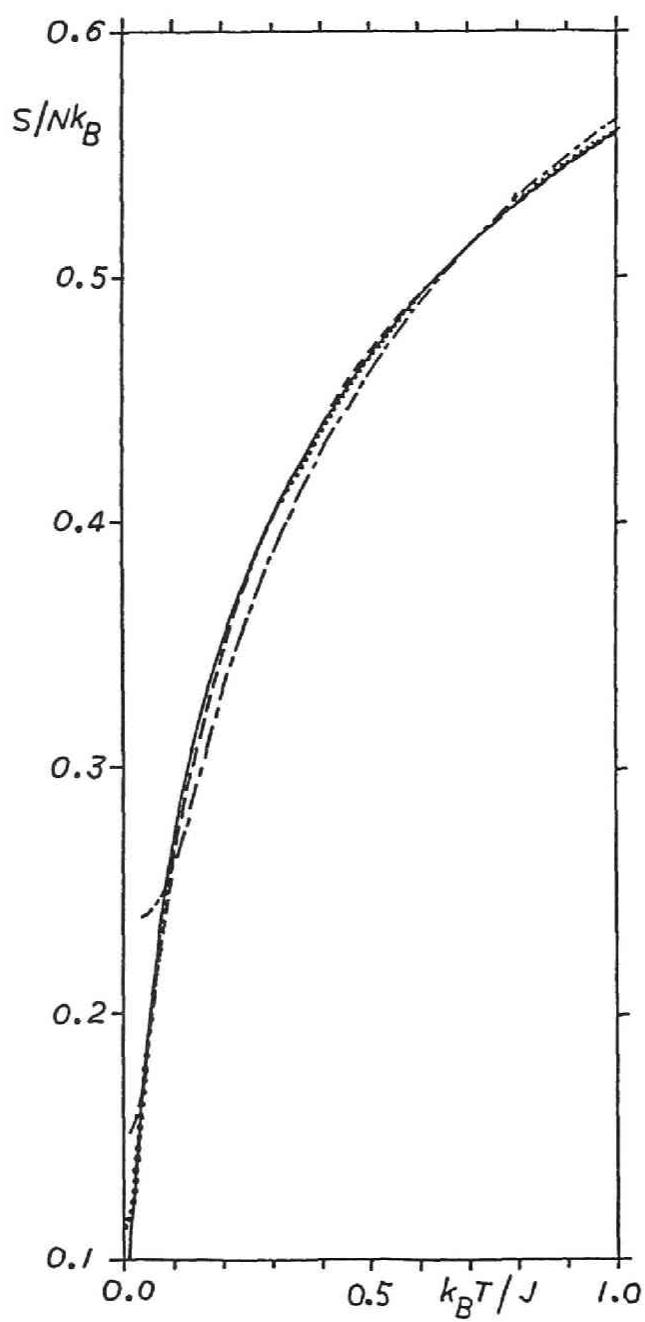


図 6.3 $N = 10, 20, 30$ および 128 に対するエントロピーの温度依存性。

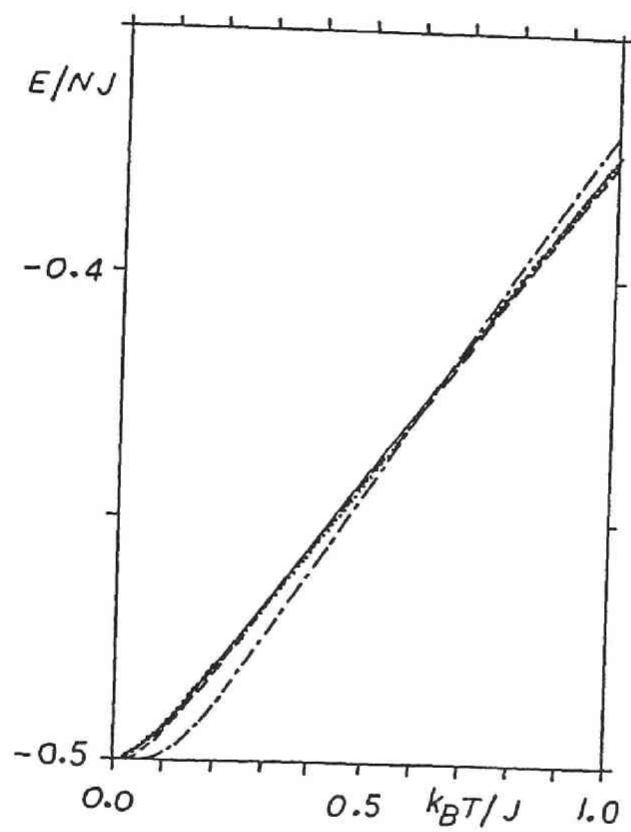


図 6.4 $N = 10, 20, 30$ および 128 に対する内部エネルギーの温度依存性。

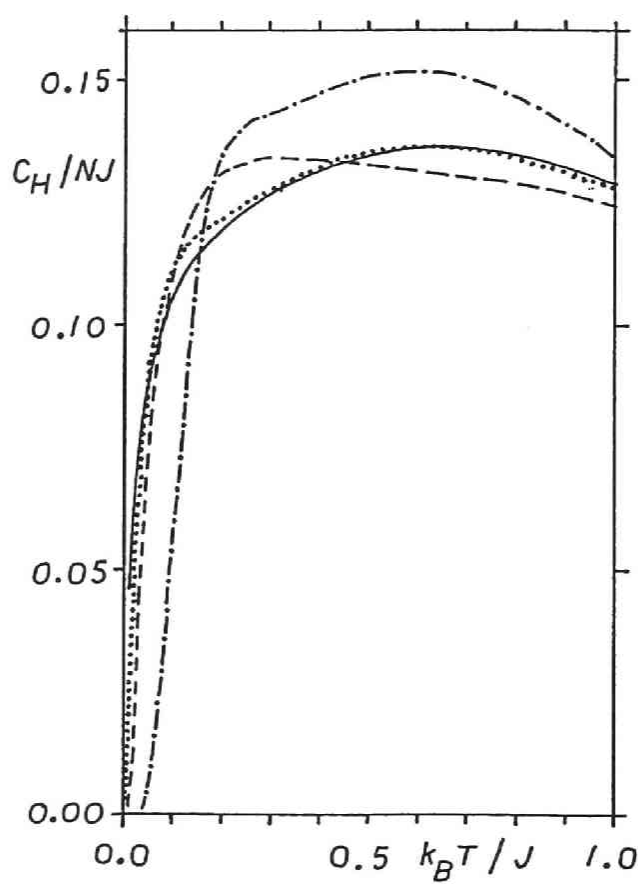


図 6.5 $N = 10, 20, 30$ および 128 に対する比熱の温度依存性。

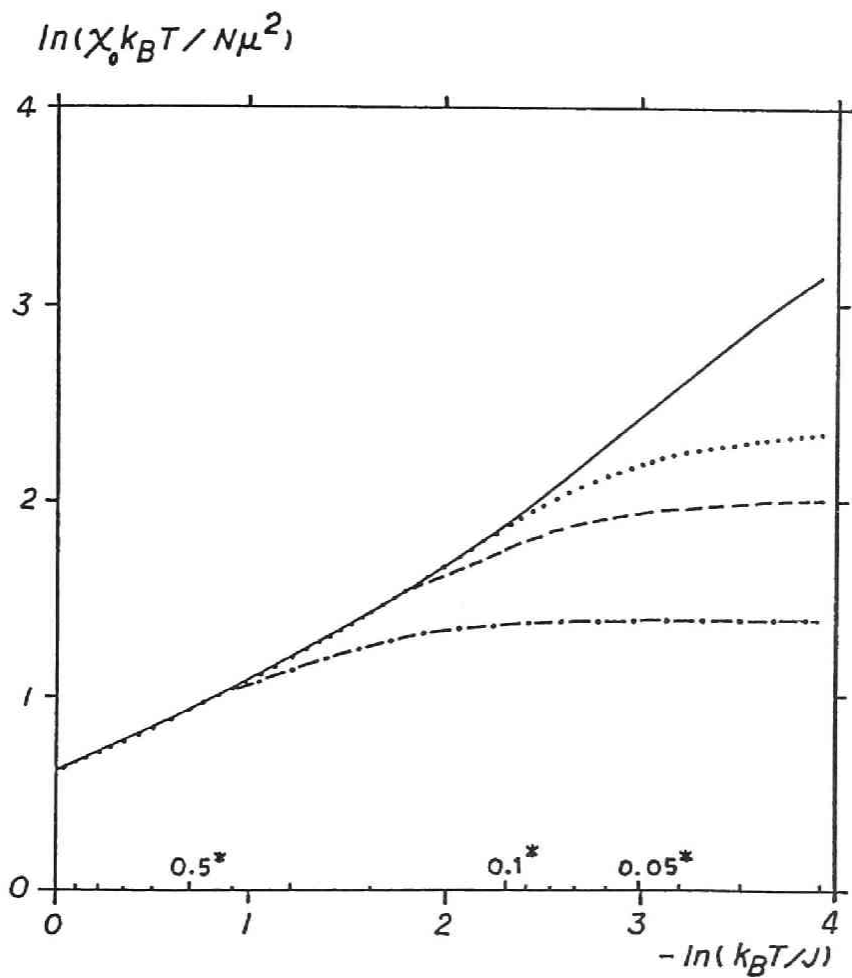


図 6.6 $N = 10, 20, 30$ および 128 に対する $-\ln(k_B T / J)$ に関する $\ln(\chi_0 k_B T / N \mu^2)$ の依存性。

値を計算するために、表 6.1 に与えられているケース (a) の展開項を \overline{A} , および \overline{D} , の内挿に用いて、 $\tau = 12,800$ までの項が表 6.5 に示された通りに取り込まれている。

更に、帯磁率に対しては、われわれの値と他の研究者のものとの比較を与える。表 6.7 において、われわれの値は、表 6.6 の結果を 3 桁の有効数字に丸めたものであり、Takahashi [36] の欄の値は文献 36 における (3.27) 式から再計算し、最後の欄における値は、Baker 達の論文 [34] の (3.9) 式で与えられた [4,5] Padé 近似を用いて再計算したものである。ところで、Baker 達は、彼らの級数展開に第 21 項まで取り込んでいるので、高温では正確な値を与える。スピン波理論の基礎に立って導き出された Takahashi の値は、低温になるほど、正確になることが、期待される。ところで、われわれの値は、温度 $\tau \geq 0.2$ に対しては、Takahashi より Baker 達の方がよく一致しているが、 $\tau < 0.2$ に対しては、Takahashi の方がはるかによく一致している。このことは、本方法が、広範な温度範囲において、如何に数値的に正確な値を導き出すかということを示すものである。 $\tau < 0.2$ に対して、Baker 達の値はわれわれのものより小さくなる。この程度に温度が下がると、最初の 22 項を取り込んだこの近似では、帯磁率を過小評価するものと思われる。これは後述のべき乗則 $\chi \sim T^{-\gamma}$ より明らかとなる。また、Chakravarty と Stein [25] の得た $N = 128$ に対する帯磁率は、 $k_B T/J = 1.0, 0.6, 0.4$ および 0.2 に対して、それぞれ $1.896 \pm 0.004, 2.328 \pm 0.007, 2.841 \pm 0.010$ および 4.210 ± 0.022 であった。この結果も、われわれの値とよく合う。われわれは、 $k_B T/J = 0.02$ から 0.10 の温度領域で、最小 2 乗法により注意深く調べてみたら、 $N = 128(a)$ に対して $\gamma = 1.79$ を得た。この値は Bonner と Fisher によってえられた外挿値 $\gamma = 1.80$ に匹敵する。Lyklema [24] は、 $\gamma = 1.75$ を得ている。Baker 達は $\gamma = 1.67$ を得ているが、この値は、いずれの値よりも低い。

表 6.7 一次元スピン $1/2$ 等方的ハイゼンベルク強磁性系における
帯磁率 $k_B T \chi_0 / N \mu^2$ の値の比較。

$k_B T / J$	<i>Ours</i> ($N = 128$)	<i>Takahashi</i>	<i>Baker et al.</i>
1.00	1.87	1.84	1.87
0.90	1.95	1.92	1.95
0.80	2.05	2.02	2.05
0.70	2.18	2.14	2.17
0.60	2.33	2.30	2.32
0.50	2.55	2.51	2.53
0.40	2.85	2.81	2.83
0.30	3.31	3.29	3.31
0.20	4.17	4.18	4.17
0.10	6.54	6.61	6.38
0.09	7.05	7.12	6.82
0.08	7.69	7.75	7.36
0.07	8.52	8.55	8.01
0.06	9.61	9.59	8.85
0.05	$1.11 \cdot 10^1$	$1.10 \cdot 10^1$	9.96
0.04	$1.34 \cdot 10^1$	$1.31 \cdot 10^1$	$1.15 \cdot 10^1$
0.03	$1.69 \cdot 10^1$	$1.65 \cdot 10^1$	$1.39 \cdot 10^1$
0.02	$2.29 \cdot 10^1$	$2.32 \cdot 10^1$	$1.82 \cdot 10^1$

表 6.8 各システムサイズに対して、 $r_M + 1$ 個の項の中で、
分配関数 Z に最大の寄与をする項 $\bar{A}_r \tau^{-r} / r!$ の指数 r 。

N	r_M	τ							
		5.0	3.0	1.0	0.8	0.6	0.5	0.1	0.05
10×10	10000	25	46	178	234	322	392	1999	3999
20×20	100000	100	182	720	937	1289	1566		
30×30	200000	219	402	1629	2115	2906	3526		

これが上で述べた温度の低いところでは、われわれの値とはずれてくることに関連している。この欠陥は、第 21 項までの係数を用いた温度の逆べきの級数を基にした Padé 近似は、われわれのものと比較して高次の項の効果を完全には取り込んでいないという事実によるものであろう。図 6.6 における、 $N = 128$ に対する、 $\chi_0 k_B T / N \mu^2$ の $\log - \log$ カーブを注意深くみてみると、 $k_B T / J \approx 0.02$ のあたりから徐々に勾配が下がっている。これは有限システム・サイズの効果の現れと思われる。このことは、システム・サイズを更に増していくと極低温では指数が更に大きくなり、2 に近づきそうである[36]。このことを調べてみるのが、今後の課題として残されている。

6.2 二次元正方格子強磁性体への応用

6.2.1 本方法の有効性と正確性

熱力学的諸量に関する結果を与える前に、係数 a_r の評価における有効性と正確性についてのいくつかの注意点を与える。表 6.8 では、 r_{Max} (与えられた τ に対する $a_r \tau^{-r} / r!$ ((2.2.12) 式参照) 中の最大値を与える項の r) が二次元系に対してまとめられている。第 2 欄は熱力学的諸量を評価するために取り込まれた項の数を示す。例えば、 $N = 10 \times 10$ の系に対して、分配関数 Z は第 10,000 項目までの項を足すことによって評価された。そして $\tau = 1.0$ に対しては $r_{Max} \approx 178$ 、 $\tau = 0.05$ に対しては $r_{Max} \approx 3999$ で最大値をとる。勿論、温度が下がるにつれて最大値は広がっていき、だんだん多くの項が分配関数に寄与し始める。表 6.8 から、 r_{Max} は大雑把には、1.0 より大きい τ に対しては $N_b / 2\tau$ 、そして 1.0 より小さな τ に対しては N_b / τ で与えられる。このことは、 τ^* 以上の温度範囲での有限系の熱力学的諸量の正確な値を得るためには、

対応する τ_M を少なくとも $\tau_{Max}(= N_b/\tau^*)$ に取らなければならない。例えば、 $\tau^* = 0.01$ に対して、 τ_{Max} は $N = 10 \times 10$, 20×20 および 30×30 に対して、それぞれ 20,000, 80,000 および 180,000 で与えられる。これらは、表 6.8 に与えられた τ_M と比較されるべきである。 τ_M についてのもう一つのチェックは、 \bar{A}_{τ_M} が $N+1$ に、どれ位近いかを調べることによって与えられる。表 6.9-a の欄 (a) に示した通り、 $N = 10 \times 10$, 20×20 および、 30×30 に対して、それぞれ $\bar{A}_{10,000} = 101.13$, $\bar{A}_{100,000} = 413.9$ および $\bar{A}_{200,000} = 988.36$ であることが分かる。これはシステム・サイズが大きくなるにつれて、 τ_M は使用コンピュータの計算時間の許す範囲内でできる限り大きく取るべきであることを示している。幸い、 $N+1$ に近い値を取る \bar{A}_τ は比較的少ないサンプル回数で評価できる。(表 6.9 参照)

次の問題は、内挿に用いられる展開係数 $A_{\tau_1}, A_{\tau_2}, \dots, A_{\tau_M}$ の整数 $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_M$ の選び方に関することである。先ず最初 A_1 は 2^{N-1} で厳密に与えられる。残りの係数は、 τ が増加するにつれて、内挿で得られた A_τ が単調に減少するように注意深く選ぶ必要がある。(5.1.1) 式の y_τ が単調関数とならないような状態が生じ易くなるのは、内挿データとして 10 個以上の係数を用いた時であることが数値実験を通じて分かった。10 個足らずの係数で、全温度領域に対する熱力学的諸量の正確な値を得ることは難しいので、これらの係数を二組選んだ。一つは、1.0 より高い τ に対する温度領域に対するもの、もう一つは十分低温に対するものである。表 6.9-a および b において、前者の場合に対して用いられたデータの組には白丸印をつけ、後者には黒丸印を付けてある。 \bar{A}_τ および \bar{D}_τ の MC 値はサンプル回数の関数として \bar{A}_τ がどのような収束性を示しているかを調べることによって決定される。われわれは、発見的に次のことを見つけだした。 $P(C_\tau)$ のトレースは、 $2^{k(C_\tau)}$ に等しい。ただし、 $k(C_\tau)$ は (2.2.11) 式に

表 6.9-a $N = 10 \times 10$, 20×20 および 30×30 スピン系に対して内挿に
用いられた \bar{A}_r (a),(b),(c) および (d) については、本文参照。
ちょっと低めの温度用のデータの組には、白丸印をつけ、かなり低温のもの
には、黒丸印をつけてある。

10×10

r	(a)	(b)	(c)	(d)
5	$4.5648 \cdot 10^{28}$ (6)	$4.5606 \cdot 10^{28}$	$4.5648 \cdot 10^{28}$	0.09
20	$1.0799 \cdot 10^{25}$ (11)	$1.0778 \cdot 10^{25}$	$1.1030 \cdot 10^{25}$	2.33
75	$2.5193 \cdot 10^{16}$ (10)	$2.4891 \cdot 10^{16}$	$2.7623 \cdot 10^{16}$	10.84
150	$9.3478 \cdot 10^9$ (10)	$8.3743 \cdot 10^9$	$1.1437 \cdot 10^{10}$	32.76
500	$1.6300 \cdot 10^3$ (11)	$1.6010 \cdot 10^3$	$1.6614 \cdot 10^3$	3.76
1000	$2.0615 \cdot 10^2$ (10)	$2.0568 \cdot 10^2$	$2.0858 \cdot 10^2$	1.41
5000	$1.0077 \cdot 10^2$ (10)	$1.0010 \cdot 10^2$	$1.0077 \cdot 10^2$	0.67
10000	$1.0113 \cdot 10^2$ (10)	$1.0018 \cdot 10^2$	$1.0113 \cdot 10^2$	0.94

20×20

r	(a)	(b)	(c)	(d)
70 ^{oo}	$2.2450 \cdot 10^{102}$ (10)	$2.1387 \cdot 10^{102}$	$2.2829 \cdot 10^{102}$	6.42
200 ^{oo}	$1.4741 \cdot 10^{78}$ (50)	$1.3867 \cdot 10^{78}$	$7.7479 \cdot 10^{78}$	431.53
400 ^o	$1.9979 \cdot 10^{53}$ (80)	$8.6775 \cdot 10^{52}$	$2.5390 \cdot 10^{53}$	83.65
700 ^{oo}	$9.2480 \cdot 10^{31}$ (29)	$2.5687 \cdot 10^{31}$	$1.2476 \cdot 10^{32}$	107.13
1,500 ^{oo}	$3.2107 \cdot 10^{13}$ (40)	$1.3764 \cdot 10^{13}$	$3.2107 \cdot 10^{13}$	57.13
10,000 ^{oo}	$2.4559 \cdot 10^3$ (.90)	$2.3292 \cdot 10^3$	$2.5794 \cdot 10^3$	10.19
100,000 [*]	$4.1390 \cdot 10^2$ (.09)	$4.1038 \cdot 10^2$	$4.1580 \cdot 10^2$	1.31

30×30

r	(a)	(b)	(c)	(d)
40 ^o	$2.5191 \cdot 10^{259}$ (20)	$2.5089 \cdot 10^{259}$	$2.5274 \cdot 10^{259}$	0.73
100 [*]	$6.3012 \cdot 10^{243}$ (20)	$5.3603 \cdot 10^{243}$	$6.6918 \cdot 10^{243}$	21.13
300 ^o	$1.0188 \cdot 10^{200}$ (50)	$9.3165 \cdot 10^{199}$	$1.4067 \cdot 10^{200}$	46.63
600 ^{oo}	$1.0492 \cdot 10^{150}$ (80)	$9.6062 \cdot 10^{149}$	$8.0836 \cdot 10^{150}$	678.90
1,000 ^{oo}	$6.9203 \cdot 10^{105}$ (60)	$2.1034 \cdot 10^{103}$	$1.7725 \cdot 10^{106}$	25.31
5,000 ^{oo}	$9.7613 \cdot 10^{18}$ (19)	$8.5068 \cdot 10^{18}$	$1.2319 \cdot 10^{19}$	39.05
20,000 ^{oo}	$1.1209 \cdot 10^6$ (3)	$1.1209 \cdot 10^6$	$1.1218 \cdot 10^6$	0.08
200,000 [*]	$9.8836 \cdot 10^2$ (.20)	$8.8986 \cdot 10^2$	$1.0321 \cdot 10^3$	14.35

おける列 C_r 内の独立したサイクルの数である。(2.2.11) 式と (2.2.13) 式を用いれば、 A_r は $(1/N_b^r) \sum_{C_r} 2^{k(C_r)}$ で与えられる。したがって、 A_r はまず r につれて急速に減少し、その後徐々に減少していく。結果として、 $A_0 = 2^N$ から $A_\infty = N+1$ まで変化する。これは、 r が増すにつれて多くの長さの短い独立したサイクルが一緒になって、より長いサイクルをつくることによるものである。この状況は3つのケースに分けられる。つまり、 $r \ll N$, $r \sim N$, および $r \gg N$ である。 $r \ll N$ のばあいには、独立したサイクルのほとんどが長さの短いものであり、それらの数は大きいので、より長いサイクルをつくることは、 A_r の急速な減少を導くことを生ぜざるをえない。他方、 $r \gg N$ の場合には、 $P(C_r)$ は少数の長さの長いサイクルからなっている。そして、関係式 (2.2.10) のために、それ以上長いサイクルをつくることを制限されている。 $r \ll N$ と $r \gg N$ のこれら2つの場合に対して N_s の関数としての \bar{A}_r は相対的に小さなサンプル回数で収束することが分かる。しかしながら、 $r \sim N$ に対しては、沢山のサンプル回数が要求される。この場合には、 $P(C_r)$ は短いものから長いものまで、色々な長さのサイクルからなっている。したがって、独立したサイクルの数は、 \bar{A}_r を評価するとき、統計的に大きくゆらぎながら、ある $P(C_r)$ から他のものへと変化する。このゆらぎによって生じる熱力学的諸量に期待される誤差は、次のようにして評価される。表 6.9-a の (a) ~ (d) 欄は、展開係数の三組を表す。(a) 欄における値は、括弧内の数の 10^5 倍で示されるサンプル回数によって得られたものである。そして、(b) 欄と (c) 欄は、それぞれ、サンプル回数の関数として見たときの平均値の最低値と最高値である。(d) 欄は \bar{A}_r の値についての相対誤差の百分率 $[(b)-(c)]/(a) \times 100$ を表す。 \bar{D}_r に対しては、表 6.9-a と同様の三組の値が表 6.9-b に与えられている。サンプル回数の関数としての \bar{A}_r と \bar{D}_r が $N = 30 \times 30$ に対して、それぞれ図 6.7-a ~ c において $r = 40, 300$ および

表 6.9-b $N = 10 \times 10$, 20×20 および 30×30 スピン系に対して内挿に用いられた \bar{D}_r . (a),(b),(c) および (d) については、本文参照.

10×10

r	(a)	(b)	(c)	(d)
5	$5.0137 \cdot 10^{30}$ (6)	$5.0093 \cdot 10^{30}$	$5.0137 \cdot 10^{30}$	0.09
20	$1.4975 \cdot 10^{27}$ (11)	$1.4950 \cdot 10^{27}$	$1.5272 \cdot 10^{27}$	2.15
75	$6.8235 \cdot 10^{18}$ (10)	$6.7417 \cdot 10^{18}$	$7.4117 \cdot 10^{18}$	9.82
150	$5.9303 \cdot 10^{12}$ (10)	$5.3128 \cdot 10^{12}$	$6.8412 \cdot 10^{12}$	25.77
500	$4.8219 \cdot 10^6$ (11)	$4.7789 \cdot 10^6$	$4.8844 \cdot 10^6$	2.19
1,000	$6.8113 \cdot 10^5$ (10)	$6.8071 \cdot 10^5$	$6.8762 \cdot 10^5$	1.01
5,000	$3.4288 \cdot 10^5$ (10)	$3.4122 \cdot 10^5$	$3.4288 \cdot 10^5$	0.48
10,000	$3.4363 \cdot 10^5$ (10)	$3.4194 \cdot 10^5$	$3.4363 \cdot 10^5$	0.49

20×20

r	(a)	(b)	(c)	(d)
70 °	$1.2064 \cdot 10^{105}$ (10)	$1.1519 \cdot 10^{105}$	$1.2254 \cdot 10^{105}$	6.09
200 °	$1.2653 \cdot 10^{81}$ (50)	$1.2130 \cdot 10^{81}$	$6.4226 \cdot 10^{81}$	411.73
400 °	$3.5654 \cdot 10^{56}$ (80)	$1.5104 \cdot 10^{56}$	$4.0284 \cdot 10^{56}$	70.62
700 °	$4.5460 \cdot 10^{35}$ (29)	$1.6899 \cdot 10^{35}$	$5.8168 \cdot 10^{35}$	90.78
1,500 °	$1.0615 \cdot 10^{18}$ (40)	$4.8627 \cdot 10^{17}$	$1.0450 \cdot 10^{18}$	54.19
10,000 °	$1.2480 \cdot 10^8$ (.90)	$1.2143 \cdot 10^8$	$1.2479 \cdot 10^8$	8.69
100,000 °	$2.1877 \cdot 10^7$ (.09)	$2.1662 \cdot 10^7$	$2.2253 \cdot 10^7$	2.70

30×30

r	(a)	(b)	(c)	(d)
40 °	$2.4659 \cdot 10^{262}$ (20)	$2.4560 \cdot 10^{262}$	$2.4739 \cdot 10^{262}$	0.73
100 °	$6.9011 \cdot 10^{246}$ (20)	$5.8806 \cdot 10^{246}$	$7.3247 \cdot 10^{246}$	20.93
300 °	$1.6143 \cdot 10^{203}$ (50)	$1.4819 \cdot 10^{203}$	$2.2076 \cdot 10^{203}$	44.95
600 °	$2.9018 \cdot 10^{153}$ (80)	$2.6611 \cdot 10^{153}$	$2.2375 \cdot 10^{154}$	674.63
1,000 °	$3.7625 \cdot 10^{109}$ (60)	$1.3334 \cdot 10^{107}$	$9.6167 \cdot 10^{109}$	255.24
5,000 °	$2.1308 \cdot 10^{24}$ (19)	$1.9756 \cdot 10^{24}$	$2.5831 \cdot 10^{24}$	28.51
20,000 °	$3.1019 \cdot 10^{11}$ (3)	$3.1019 \cdot 10^{11}$	$3.1288 \cdot 10^{11}$	0.87
200,000 °	$2.5466 \cdot 10^8$ (.20)	$2.3063 \cdot 10^8$	$2.5937 \cdot 10^8$	11.29

200,000 に対してプロットされている。a で示した点は、 N_r の最大回数で得られた値に対応している。点 b と c は \overline{A}_r の初期の部分をつか飛ばした時の、それぞれ最低値と最高値に対応している。内挿で用いた展開係数のこれらの誤差が最終的な熱力学的諸量にどのように伝播していくかを調べるために、帯磁率が、表 6.9-a および b における三組の \overline{A}_r と \overline{D}_r を用いて評価される。この値は、表 6.10-a ~ c のそれぞれの欄 (a) ~ (c) で与えられる。それらを実評価するために、 $N = 10 \times 10$ の場合には、表 6.9-a と b で与えられたすべての第 r 項の係数が用いられる。他方、 $N = 20 \times 20$ および 30×30 に対しては、白丸印の第 r 項の係数が用いられる。 \overline{A}_r と \overline{D}_r にみられる大きな誤差（最悪の場合には、675% もの値の差を持つ（表 6.9-b の $N = 30 \times 30$ 場合も参照））にもかかわらず、帯磁率における誤差は考察下の温度を通して、多くとも約 50% 位に減っている。つまり、展開係数の精度は、熱力学的諸量の最終的な値にはかなり鈍感である。このことが、なぜ本方法が数値的に正確な結果をもたらすことができるかということの、主たる理由である。

6.2.2 熱力学的諸量

熱力学的諸量の結果は、次の \overline{A}_r および \overline{D}_r を用いて得られた。すべての系において、厳密な係数 A_1 は内挿データとして用いられた。 $N = 10 \times 10$ に対しては、表 6.9-a および b における (a) 欄の全部の係数が A_1 と合わせて用いられた。他方、 $N = 20 \times 20$ および 30×30 に対しては黒丸印の r が用いられた。

さて、熱力学的諸量を詳細に調べよう。まず最初、エントロピーを表 6.11 に示す。温度が零に近づくにつれて零点エントロピー $(1/N) \ln(N+1)$ に近づく。特に、 $N = 10$ の場合には、 $\tau = 0.03$ の近くでこの値に接近している。

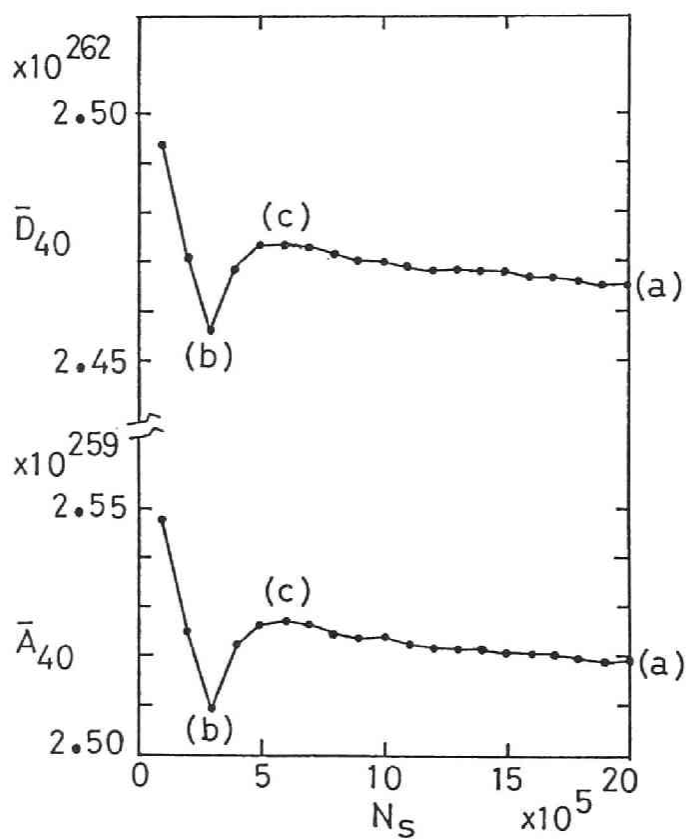


図 6.7-a $N = 30 \times 30$ に対する $r = 40$ の時のサンプル回数 N_s の関数としての平均値 \bar{A}_r および \bar{D}_r 。
(a),(b) および (c) については本文参照。

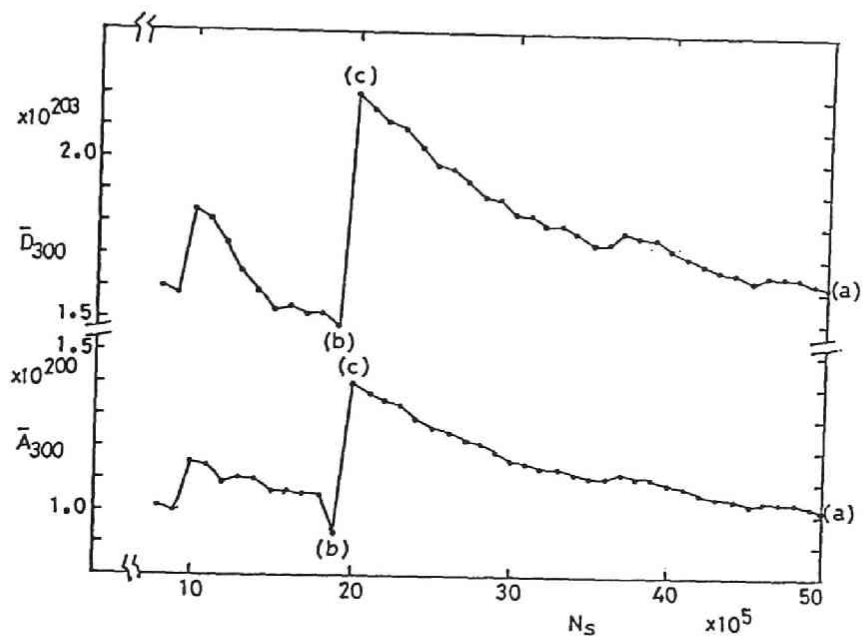


図 6.7-b $N = 30 \times 30$ に対する $r = 300$ についてのものである
 以外は図 6.7-a と同じである。

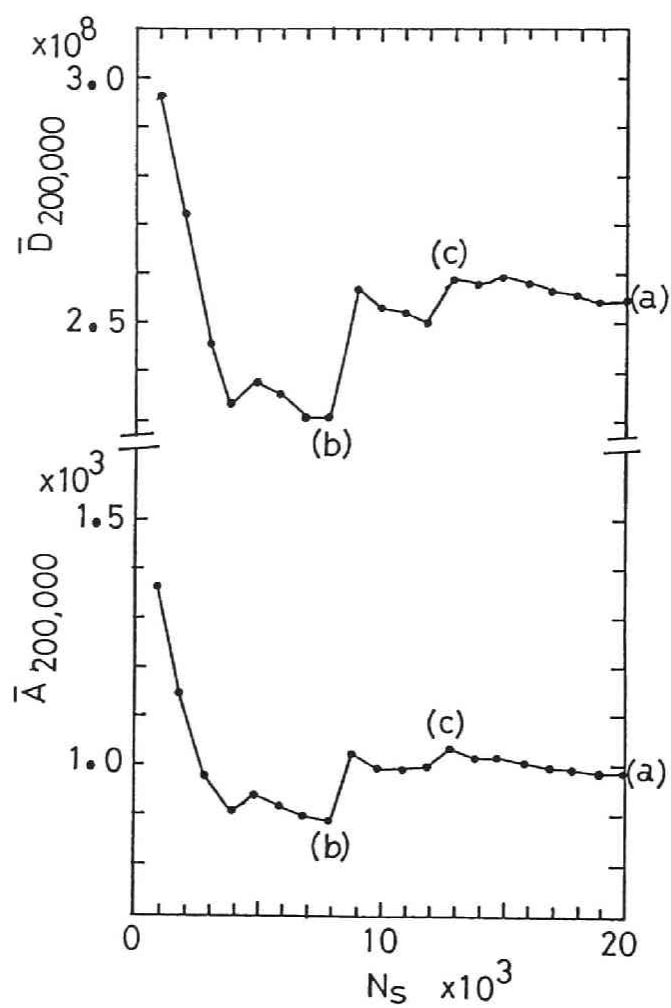


図 6.7-c $N = 30 \times 30$ に対する $r = 200,000$ についてのものである以外は図 6.7-a と同じである。

表 6.10-a $N = 10 \times 10$ スピンに対する帯磁率の値の数値例。
 表 6.9-a および b で与えられた内挿データに対応した結果である。

$k_B T/J$	(a)	(b)	(c)	(d)
10.00	1.2215	1.2216	1.2211	0.04
9.00	1.2491	1.2491	1.2485	0.05
8.00	1.2844	1.2846	1.2837	0.07
7.00	1.3315	1.3318	1.3304	0.10
6.00	1.3970	1.3976	1.3954	0.16
5.00	1.4945	1.4957	1.4920	0.25
4.00	1.6540	1.6565	1.6503	0.37
3.00	1.9602	1.9644	1.9534	0.56
2.00	2.7748	2.7702	2.7492	0.76
1.00	8.7072	8.7826	8.0581	8.32
0.90	$1.0844 \cdot 10^1$	$1.1014 \cdot 10^1$	$1.2277 \cdot 10^1$	11.65
0.80	$1.3677 \cdot 10^1$	$1.3972 \cdot 10^1$	$1.2504 \cdot 10^1$	10.74
0.70	$1.7251 \cdot 10^1$	$1.7674 \cdot 10^1$	$1.5875 \cdot 10^1$	10.43
0.60	$2.1411 \cdot 10^1$	$2.1901 \cdot 10^1$	$2.0062 \cdot 10^1$	8.59
0.50	$2.5702 \cdot 10^1$	$2.6142 \cdot 10^1$	$2.4757 \cdot 10^1$	5.39
0.40	$2.9409 \cdot 10^1$	$2.9688 \cdot 10^1$	$2.9182 \cdot 10^1$	1.72
0.30	$3.1878 \cdot 10^1$	$3.1989 \cdot 10^1$	$3.2193 \cdot 10^1$	0.64
0.20	$3.3036 \cdot 10^1$	$3.3090 \cdot 10^1$	$3.2966 \cdot 10^1$	0.38
0.10	$3.3663 \cdot 10^1$	$3.3715 \cdot 10^1$	$3.2336 \cdot 10^1$	4.10

表 6.10-b $N = 20 \times 20$ スピンに対する帯磁率の値の数値例。

$k_B T/J$	(a)	(b)	(c)	(d)
10.00	1.2255	1.2070	1.3401	10.86
9.00	1.2524	1.2380	1.3402	8.16
8.00	1.2870	1.2790	1.3405	5.13
7.00	1.3330	1.3347	1.3450	0.77
6.00	1.3977	1.4141	1.3634	3.63
5.00	1.4961	1.5333	1.4181	7.70
4.00	1.6654	1.7258	1.5636	9.74
3.00	2.0246	2.0755	1.9385	6.77
2.00	3.1399	3.0086	2.9375	2.26
1.00	$1.3089 \cdot 10^1$	$1.7826 \cdot 10^1$	$1.2615 \cdot 10^1$	39.81
0.90	$1.7906 \cdot 10^1$	$2.5617 \cdot 10^1$	$1.8011 \cdot 10^1$	42.48
0.80	$2.5763 \cdot 10^1$	$3.7046 \cdot 10^1$	$2.6870 \cdot 10^1$	39.50
0.70	$3.8680 \cdot 10^1$	$5.2675 \cdot 10^1$	$4.1277 \cdot 10^1$	29.47
0.60	$5.9389 \cdot 10^1$	$7.1968 \cdot 10^1$	$6.3823 \cdot 10^1$	13.71
0.50	$9.0095 \cdot 10^1$	$9.2700 \cdot 10^1$	$9.6245 \cdot 10^1$	3.93
0.40	$1.2860 \cdot 10^2$	$1.1123 \cdot 10^2$	$1.3578 \cdot 10^2$	19.09
0.30	$1.6244 \cdot 10^2$	$1.2405 \cdot 10^2$	$1.6990 \cdot 10^2$	28.23
0.20	$1.6964 \cdot 10^2$	$1.2982 \cdot 10^2$	$1.7632 \cdot 10^2$	27.41
0.10	$1.3730 \cdot 10^2$	$1.3046 \cdot 10^2$	$1.3983 \cdot 10^2$	6.82

しかし、このことをもっと明らかにするために、より高次の展開係数を取り込んだ量を評価する必要がある。図 6.8 では、エントロピーが、還元温度 $\tau (= k_B T / J)$ の関数としてプロットされている。第 2 に、内部エネルギーのわれわれの結果が表 6.12 に示されている。この表から、われわれの値が、考察された系すべてに対して、零点エネルギー -1.0 に如何に近いかが分かるであろう。図 6.9 では、その結果が τ の関数としてプロットされている。第 3 に、比熱の結果が $\tau = 10 \sim 0.01$ に対して表 6.13 に示されており、図 6.10 に τ の関数としてプロットされている。表 6.13 の最後の欄の値は Baker 達によって級数展開を用いて導き出されたものである。級数は最初の 9 項の係数を含んでいるので、その結果は高温に対してのみ妥当である。彼らの結果と比較すると、 $\tau > 4.0$ に対しては、彼らの値は $N = 10 \times 10$ のわれわれの値と申し分ない一致を与えるが、 $\tau < 4.0$ に対しては彼らの値はわれわれのものからずれてきて、 $\tau = 1.0$ では物理的には許されない負号に変わってしまう。これに対比して、展開係数を十分取り込んで得られたわれわれの値は、十分低温に対しても有効であるものと確信している。最後に帯磁率が表 6.14 に示され、図 6.11 に τ の関数としてプロットされる。最後の欄の値は Baker 達 [35] によって与えられた 10 項までの級数展開を用いたものを再計算したものである。彼らの値とサイズ 10×10 のわれわれの値との間の一致は 2.0 以上の高い温度では有効数字 3 桁とすばらしくよい。サイズ 30×30 の両者間の一致は同じ温度範囲で大体良い。他方、サイズ 20×20 のわれわれのものは、この温度範囲において、他のものと比べて妙な振る舞いを示す。しかしながら、表 6.10-b の欄 (a) の値は 2.0 より高い温度に対して Baker 達のもとの良い一致を示す。この主な理由は、表 6.9-b において、 \overline{A}_{400} と \overline{D}_{400} が内挿データとして用いられているかいないかということにある。この状況は関連の温度範囲に対して帯磁率の正確な値を出すには、言い替えば、 $\tau \sim 400$ に対する

表 6.10-c $N = 30 \times 30$ スピンに対する帯磁率の値の数値例。

$k_B T/J$	(a)	(b)	(c)	(d)
10.00	1.1470	1.2264	1.2077	1.63
9.00	1.1667	1.2558	1.2331	1.95
8.00	1.1967	1.2940	1.2667	2.28
7.00	1.2437	1.3456	1.3133	2.60
6.00	1.3210	1.4192	1.3826	2.77
5.00	1.4541	1.5321	1.4951	2.54
4.00	1.6979	1.7262	1.7010	1.48
3.00	2.1826	2.1315	2.1481	0.76
2.00	3.4400	3.4615	3.4644	0.08
1.00	$1.9605 \cdot 10^1$	$2.7264 \cdot 10^1$	$1.8336 \cdot 10^1$	45.54
0.90	$2.8018 \cdot 10^1$	$4.0318 \cdot 10^1$	$2.6110 \cdot 10^1$	50.71
0.80	$4.1393 \cdot 10^1$	$6.0269 \cdot 10^1$	$3.8617 \cdot 10^1$	52.31
0.70	$6.2650 \cdot 10^1$	$8.9560 \cdot 10^1$	$5.8738 \cdot 10^1$	49.20
0.60	$9.5779 \cdot 10^1$	$1.2995 \cdot 10^2$	$9.0453 \cdot 10^1$	41.24
0.50	$1.4489 \cdot 10^2$	$1.8072 \cdot 10^2$	$1.3790 \cdot 10^2$	29.55
0.40	$2.1068 \cdot 10^2$	$2.3644 \cdot 10^2$	$2.0190 \cdot 10^2$	16.39
0.30	$2.8280 \cdot 10^2$	$2.8584 \cdot 10^2$	$2.7277 \cdot 10^2$	4.62
0.20	$3.3137 \cdot 10^2$	$3.1416 \cdot 10^2$	$3.2310 \cdot 10^2$	2.70
0.10	$3.1397 \cdot 10^2$	$3.0987 \cdot 10^2$	$3.1494 \cdot 10^2$	1.61

表 6.11 $N = 10 \times 10, 20 \times 20$ および 30×30 スピンに対するエントロピー S/Nk_B の値。

ただし、温度零度での値は零点エントロピーの厳密値

$k_B T/J$	10×10	20×20	30×30
1.00	$3.8499 \cdot 10^{-1}$	$3.6698 \cdot 10^{-1}$	$3.5128 \cdot 10^{-1}$
0.90	$3.4566 \cdot 10^{-1}$	$3.2760 \cdot 10^{-1}$	$3.1308 \cdot 10^{-1}$
0.80	$3.0258 \cdot 10^{-1}$	$2.8601 \cdot 10^{-1}$	$2.7312 \cdot 10^{-1}$
0.70	$2.5716 \cdot 10^{-1}$	$2.4313 \cdot 10^{-1}$	$2.3228 \cdot 10^{-1}$
0.60	$2.1134 \cdot 10^{-1}$	$2.0006 \cdot 10^{-1}$	$1.9157 \cdot 10^{-1}$
0.50	$1.6741 \cdot 10^{-1}$	$1.5804 \cdot 10^{-1}$	$1.5206 \cdot 10^{-1}$
0.40	$1.2767 \cdot 10^{-1}$	$1.1839 \cdot 10^{-1}$	$1.1488 \cdot 10^{-1}$
0.30	$9.4156 \cdot 10^{-2}$	$8.2587 \cdot 10^{-2}$	$8.1088 \cdot 10^{-2}$
0.20	$6.8377 \cdot 10^{-2}$	$5.2232 \cdot 10^{-2}$	$5.1582 \cdot 10^{-2}$
0.10	$5.1391 \cdot 10^{-2}$	$2.9031 \cdot 10^{-2}$	$2.6886 \cdot 10^{-2}$
0.09	$5.0237 \cdot 10^{-2}$	$2.7117 \cdot 10^{-2}$	$2.4683 \cdot 10^{-2}$
0.08	$4.9197 \cdot 10^{-2}$	$2.5401 \cdot 10^{-2}$	$2.2527 \cdot 10^{-2}$
0.07	$4.8278 \cdot 10^{-2}$	$2.3723 \cdot 10^{-2}$	$2.0417 \cdot 10^{-2}$
0.06	$4.7490 \cdot 10^{-2}$	$2.2139 \cdot 10^{-2}$	$1.8352 \cdot 10^{-2}$
0.05	$4.6847 \cdot 10^{-2}$	$2.0649 \cdot 10^{-2}$	$1.6331 \cdot 10^{-2}$
0.04	$4.6362 \cdot 10^{-2}$	$1.9256 \cdot 10^{-2}$	$1.4353 \cdot 10^{-2}$
0.03	$4.6059 \cdot 10^{-2}$	$1.7961 \cdot 10^{-2}$	$1.2417 \cdot 10^{-2}$
0.02		$1.6765 \cdot 10^{-2}$	$1.0522 \cdot 10^{-2}$
0.01		$1.5670 \cdot 10^{-2}$	$8.6659 \cdot 10^{-3}$
0.00	$4.6151 \cdot 10^{-2}$	$1.4985 \cdot 10^{-2}$	$7.5595 \cdot 10^{-3}$

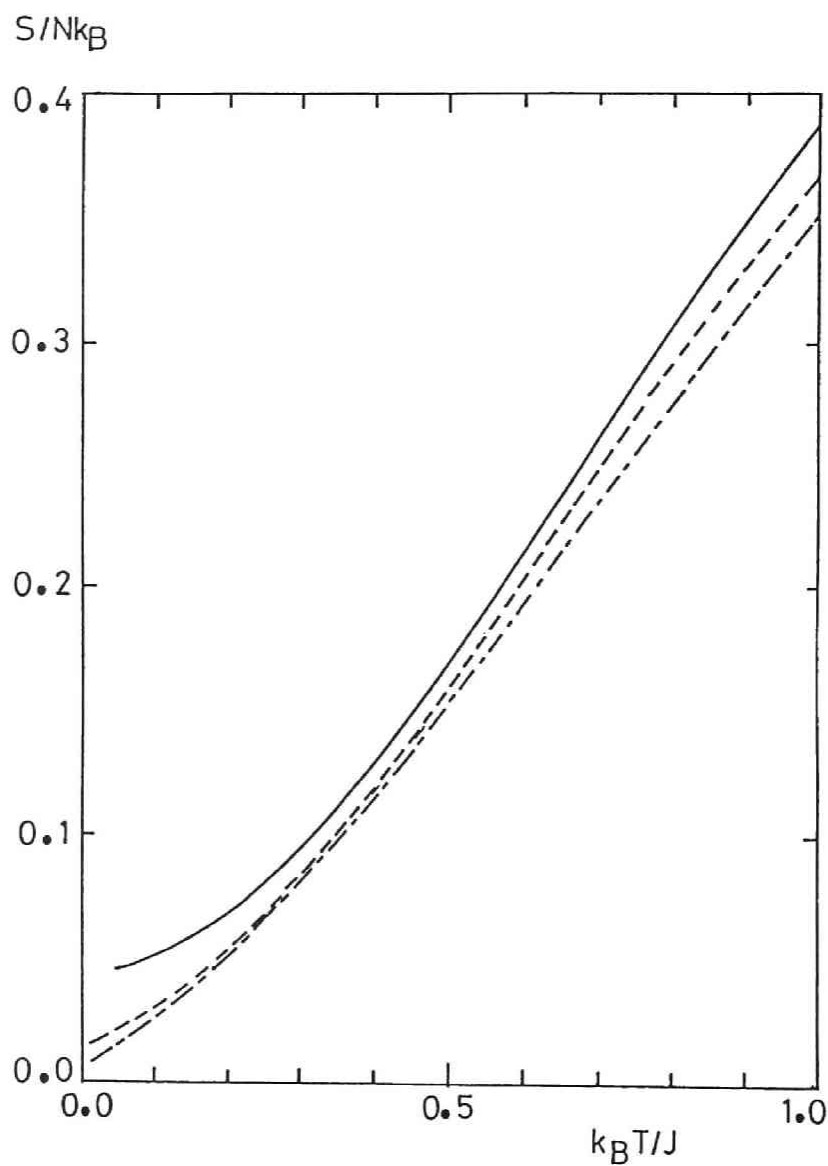


図 6.8 $N = 10 \times 10$ (—), 20×20 (---) および 30×30 (— · — · —) に対するエントロピーの温度依存性。
曲線を指定する線種は以下の図においても同様に用いる。

表 6.12 $N = 10 \times 10, 20 \times 20$ および 30×30 に対する内部エネルギーの値

$k_B T/J$	10×10	20×20	30×30
1.00	$7.9881 \cdot 10^{-1}$	$8.0157 \cdot 10^{-1}$	$8.1012 \cdot 10^{-1}$
0.90	$8.3614 \cdot 10^{-1}$	$8.3896 \cdot 10^{-1}$	$8.4640 \cdot 10^{-1}$
0.80	$8.7273 \cdot 10^{-1}$	$8.7430 \cdot 10^{-1}$	$8.8035 \cdot 10^{-1}$
0.70	$9.0678 \cdot 10^{-1}$	$9.0645 \cdot 10^{-1}$	$9.1097 \cdot 10^{-1}$
0.60	$9.3657 \cdot 10^{-1}$	$9.3445 \cdot 10^{-1}$	$9.3744 \cdot 10^{-1}$
0.50	$9.6076 \cdot 10^{-1}$	$9.5758 \cdot 10^{-1}$	$9.5919 \cdot 10^{-1}$
0.40	$9.7869 \cdot 10^{-1}$	$9.7544 \cdot 10^{-1}$	$9.7594 \cdot 10^{-1}$
0.30	$9.9047 \cdot 10^{-1}$	$9.8801 \cdot 10^{-1}$	$9.8780 \cdot 10^{-1}$
0.20	$9.9699 \cdot 10^{-1}$	$9.9566 \cdot 10^{-1}$	$9.9522 \cdot 10^{-1}$
0.10	$9.9961 \cdot 10^{-1}$	$9.9920 \cdot 10^{-1}$	$9.9896 \cdot 10^{-1}$
0.09	$9.9972 \cdot 10^{-1}$	$9.9938 \cdot 10^{-1}$	$9.9917 \cdot 10^{-1}$
0.08	$9.9981 \cdot 10^{-1}$	$9.9953 \cdot 10^{-1}$	$9.9936 \cdot 10^{-1}$
0.07	$9.9988 \cdot 10^{-1}$	$9.9966 \cdot 10^{-1}$	$9.9951 \cdot 10^{-1}$
0.06	$9.9993 \cdot 10^{-1}$	$9.9976 \cdot 10^{-1}$	$9.9965 \cdot 10^{-1}$
0.05	$9.9997 \cdot 10^{-1}$	$9.9984 \cdot 10^{-1}$	$9.9976 \cdot 10^{-1}$
0.04	$9.9999 \cdot 10^{-1}$	$9.9990 \cdot 10^{-1}$	$9.9985 \cdot 10^{-1}$
0.03	1.0000	$9.9995 \cdot 10^{-1}$	$9.9992 \cdot 10^{-1}$
0.02		$9.9998 \cdot 10^{-1}$	$9.9996 \cdot 10^{-1}$
0.01		$9.9999 \cdot 10^{-1}$	$9.9999 \cdot 10^{-1}$

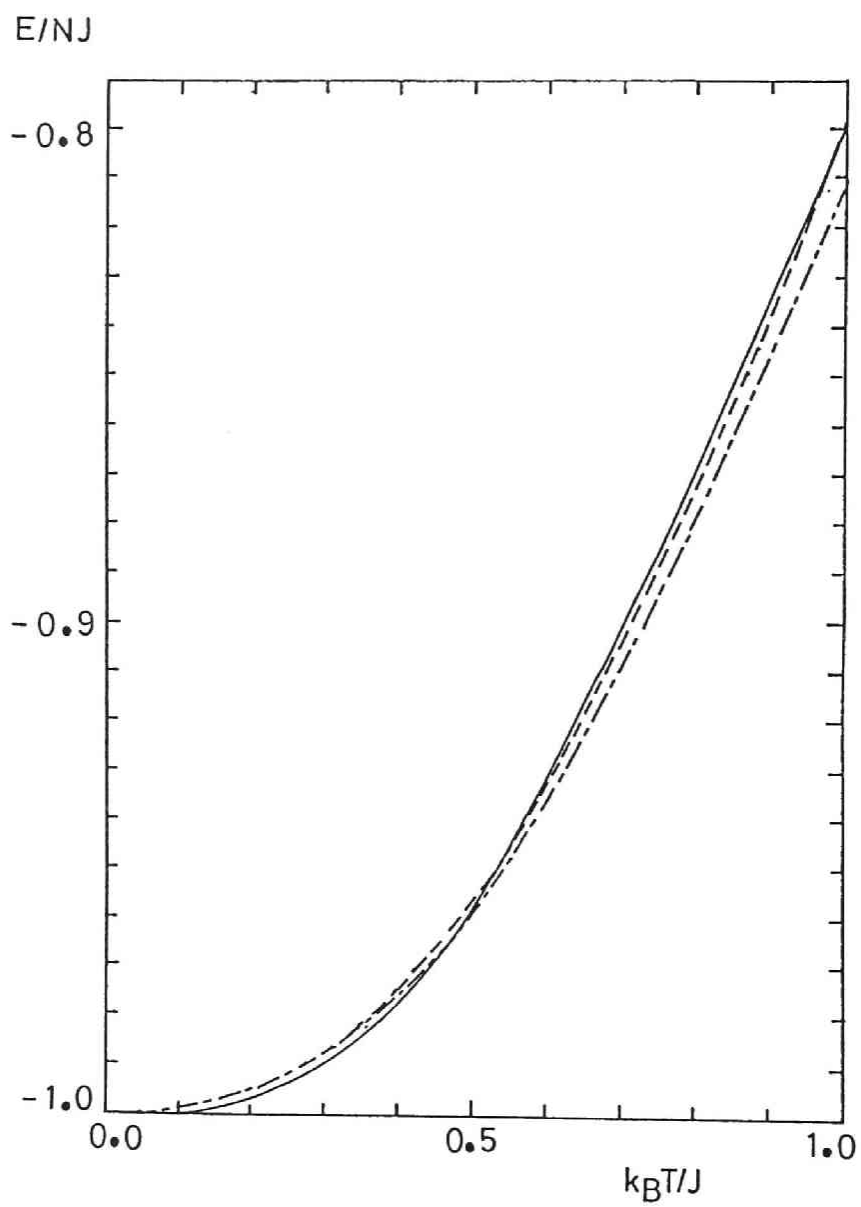


図 6.9 $N = 10 \times 10, 20 \times 20$ および 30×30 に対する内部エネルギーの温度依存性。

表 6.13 $N = 10 \times 10, 20 \times 20$ および 30×30 に対する比熱 C_H/Nk_B の値。右端の欄は Baker 達 [35] の値を示す。

$k_B T/J$	10×10	20×20	30×30	Baker et al.
10.00	$1.36 \cdot 10^{-2}$	$1.34 \cdot 10^{-2}$	$9.90 \cdot 10^{-3}$	$1.33 \cdot 10^{-2}$
9.00	$1.65 \cdot 10^{-2}$	$1.60 \cdot 10^{-2}$	$1.22 \cdot 10^{-2}$	$1.62 \cdot 10^{-2}$
8.00	$2.05 \cdot 10^{-2}$	$1.92 \cdot 10^{-2}$	$1.53 \cdot 10^{-2}$	$2.01 \cdot 10^{-2}$
7.00	$2.61 \cdot 10^{-2}$	$2.36 \cdot 10^{-2}$	$1.99 \cdot 10^{-2}$	$2.55 \cdot 10^{-2}$
6.00	$3.42 \cdot 10^{-2}$	$2.96 \cdot 10^{-2}$	$2.68 \cdot 10^{-2}$	$3.35 \cdot 10^{-2}$
5.00	$4.63 \cdot 10^{-2}$	$3.86 \cdot 10^{-2}$	$3.81 \cdot 10^{-2}$	$4.57 \cdot 10^{-2}$
4.00	$6.53 \cdot 10^{-2}$	$5.38 \cdot 10^{-2}$	$5.86 \cdot 10^{-2}$	$6.58 \cdot 10^{-2}$
3.00	$9.82 \cdot 10^{-2}$	$8.69 \cdot 10^{-2}$	$1.02 \cdot 10^{-1}$	$1.02 \cdot 10^{-1}$
2.00	$1.72 \cdot 10^{-1}$	$1.91 \cdot 10^{-1}$	$2.18 \cdot 10^{-1}$	$1.79 \cdot 10^{-1}$
1.00	$3.72 \cdot 10^{-1}$	$3.80 \cdot 10^{-1}$	$3.71 \cdot 10^{-1}$	$-1.99 \cdot 10^{-1}$
0.90	$3.73 \cdot 10^{-1}$	$3.66 \cdot 10^{-1}$	$3.53 \cdot 10^{-1}$	
0.80	$3.56 \cdot 10^{-1}$	$3.39 \cdot 10^{-1}$	$3.24 \cdot 10^{-1}$	
0.70	$3.22 \cdot 10^{-1}$	$3.02 \cdot 10^{-1}$	$2.87 \cdot 10^{-1}$	
0.60	$2.72 \cdot 10^{-1}$	$2.57 \cdot 10^{-1}$	$2.42 \cdot 10^{-1}$	
0.50	$2.11 \cdot 10^{-1}$	$2.05 \cdot 10^{-1}$	$1.93 \cdot 10^{-1}$	
0.40	$1.48 \cdot 10^{-1}$	$1.52 \cdot 10^{-1}$	$1.43 \cdot 10^{-1}$	
0.30	$8.95 \cdot 10^{-2}$	$1.00 \cdot 10^{-1}$	$9.53 \cdot 10^{-2}$	
0.20	$4.31 \cdot 10^{-2}$	$5.41 \cdot 10^{-2}$	$5.43 \cdot 10^{-2}$	
0.10	$1.21 \cdot 10^{-2}$	$1.90 \cdot 10^{-2}$	$2.23 \cdot 10^{-2}$	
0.09	$9.89 \cdot 10^{-3}$	$1.63 \cdot 10^{-2}$	$1.96 \cdot 10^{-2}$	
0.08	$7.85 \cdot 10^{-3}$	$1.38 \cdot 10^{-2}$	$1.71 \cdot 10^{-2}$	
0.07	$5.98 \cdot 10^{-3}$	$1.14 \cdot 10^{-2}$	$1.46 \cdot 10^{-2}$	
0.06	$4.31 \cdot 10^{-3}$	$9.22 \cdot 10^{-3}$	$1.22 \cdot 10^{-2}$	
0.05	$2.84 \cdot 10^{-3}$	$7.21 \cdot 10^{-3}$	$9.99 \cdot 10^{-3}$	
0.04	$1.59 \cdot 10^{-3}$	$5.38 \cdot 10^{-3}$	$7.83 \cdot 10^{-3}$	
0.03	$6.14 \cdot 10^{-4}$	$3.74 \cdot 10^{-3}$	$5.75 \cdot 10^{-3}$	
0.02		$2.29 \cdot 10^{-3}$	$3.75 \cdot 10^{-3}$	
0.01		$1.05 \cdot 10^{-3}$	$1.84 \cdot 10^{-3}$	

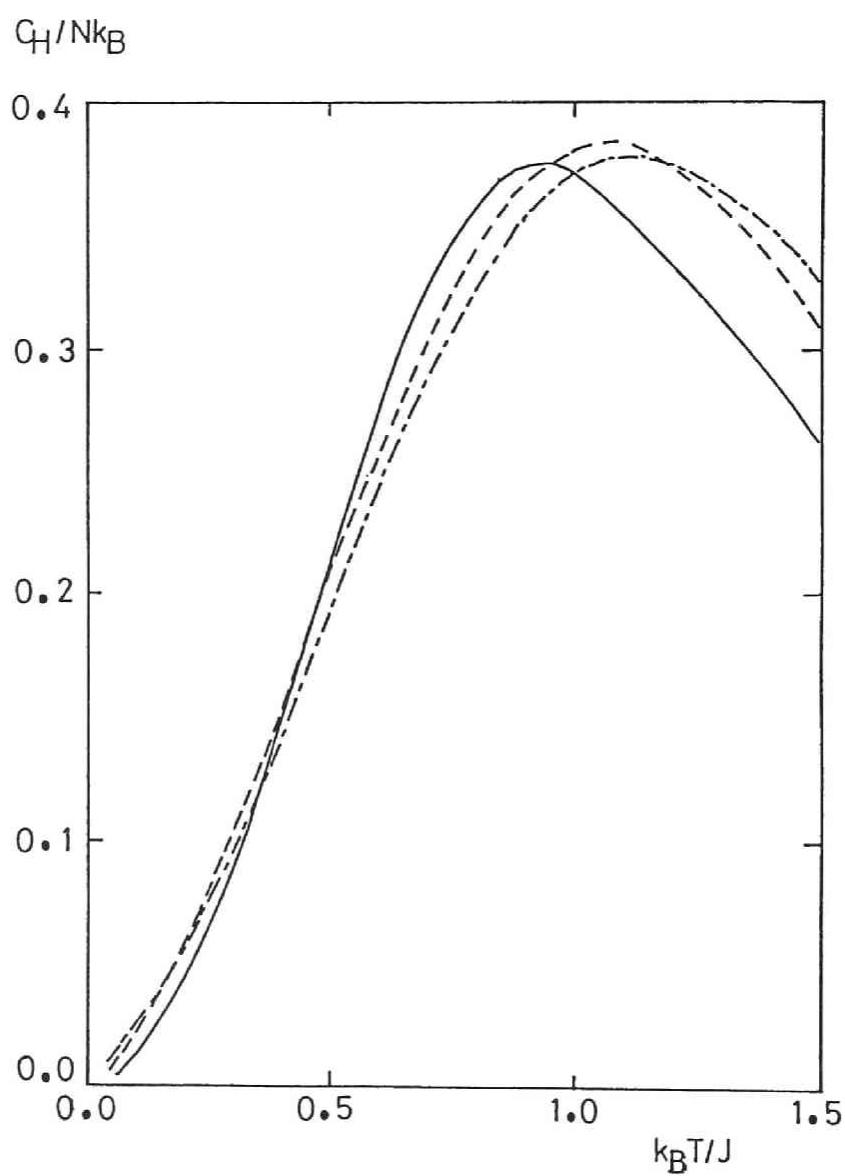


図 6.10 $N = 10 \times 10$, 20×20 および 30×30 に対する比熱の温度依存性。

表 6.14 $N = 10 \times 10, 20 \times 20$ および 30×30 に対する帯磁率 $k_B T \chi_0 / N \mu^2$ の値。右端の値は Baker 達 [35] の値を示す。

$k_B T / J$	10×10	20×20	30×30	<i>Baker et al.</i>
10.00	1.2215	$8.8923 \cdot 10^1$	1.2201	1.2215
9.00	1.2491	$9.8448 \cdot 10^1$	1.2569	1.2489
8.00	1.2844	1.1195	1.3060	1.2842
7.00	1.3315	1.3116	1.3737	1.3309
6.00	1.3970	1.5800	1.4713	1.3961
5.00	1.4945	1.9237	1.6200	1.4928
4.00	1.6540	2.2433	1.8621	1.6513
3.00	1.9602	2.2243	2.2986	1.9572
2.00	2.7748	1.9167	3.4220	2.7798
1.00	8.7072	$1.3673 \cdot 10^1$	$2.1523 \cdot 10^1$	9.5698
0.90	$1.0844 \cdot 10^1$	$2.0824 \cdot 10^1$	$3.1637 \cdot 10^1$	$1.3176 \cdot 10^1$
0.80	$1.3677 \cdot 10^1$	$3.1626 \cdot 10^1$	$4.7729 \cdot 10^1$	$1.9823 \cdot 10^1$
0.70	$1.7251 \cdot 10^1$	$4.6793 \cdot 10^1$	$7.2704 \cdot 10^1$	$3.2792 \cdot 10^1$
0.60	$2.1411 \cdot 10^1$	$6.5955 \cdot 10^1$	$1.0950 \cdot 10^2$	$5.4648 \cdot 10^1$
0.50	$2.5702 \cdot 10^1$	$8.6916 \cdot 10^1$	$1.5911 \cdot 10^2$	$1.1590 \cdot 10^2$
0.40	$2.9409 \cdot 10^1$	$1.0580 \cdot 10^2$	$2.1735 \cdot 10^2$	$-1.7890 \cdot 10^3$
0.30	$3.1878 \cdot 10^1$	$1.1872 \cdot 10^2$	$2.7224 \cdot 10^2$	
0.20	$3.3036 \cdot 10^1$	$1.2449 \cdot 10^2$	$3.0674 \cdot 10^2$	
0.10	$3.3663 \cdot 10^1$	$1.2645 \cdot 10^2$	$3.0904 \cdot 10^2$	
0.09	$3.3734 \cdot 10^1$	$1.2671 \cdot 10^2$	$3.0749 \cdot 10^2$	
0.08	$3.3806 \cdot 10^1$	$1.2703 \cdot 10^2$	$3.0567 \cdot 10^2$	
0.07	$3.3876 \cdot 10^1$	$1.2742 \cdot 10^2$	$3.0358 \cdot 10^2$	
0.06	$3.3940 \cdot 10^1$	$1.2788 \cdot 10^2$	$3.0125 \cdot 10^2$	
0.05	$3.3994 \cdot 10^1$	$1.2844 \cdot 10^2$	$2.9869 \cdot 10^2$	
0.04	$3.4026 \cdot 10^1$	$1.2910 \cdot 10^2$	$2.9593 \cdot 10^2$	
0.03	$3.4026 \cdot 10^1$	$1.2989 \cdot 10^2$	$2.9298 \cdot 10^2$	
0.02		$1.3081 \cdot 10^2$	$2.8986 \cdot 10^2$	
0.01		$1.3190 \cdot 10^2$	$2.8662 \cdot 10^2$	

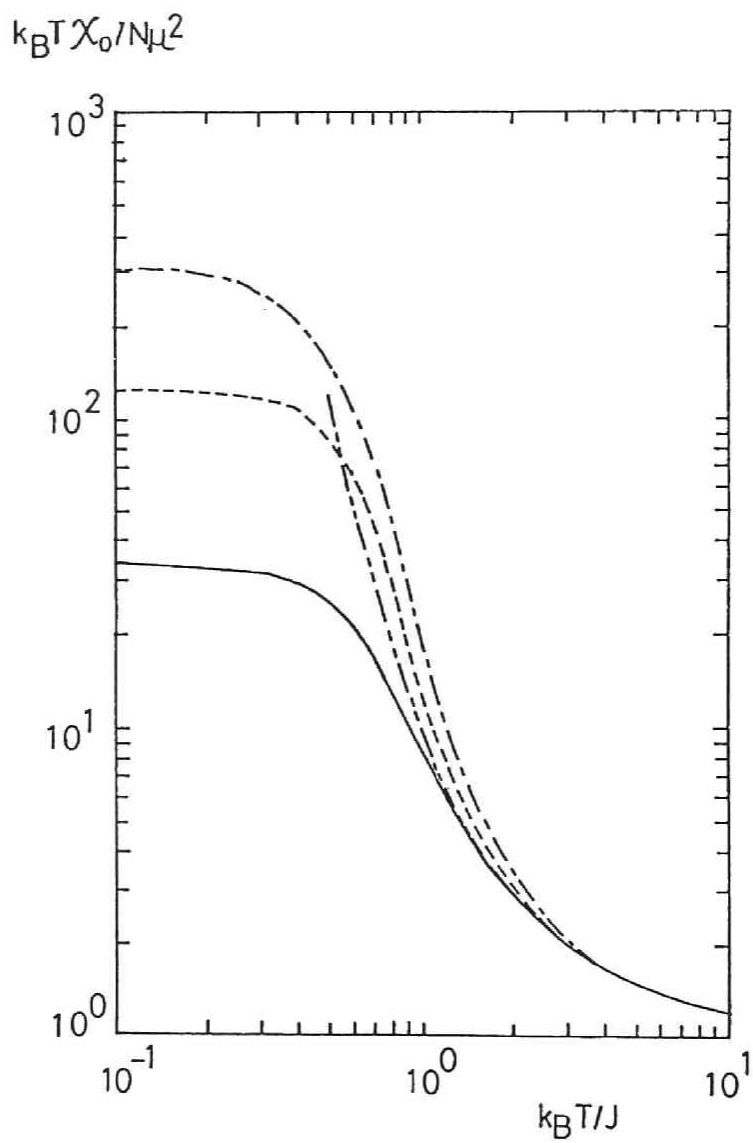


図 6.11 $N = 10 \times 10$, 20×20 および 30×30 に対する
 帯磁率の温度依存性。
 Baker 達の結果 [35] (— — —) もまた示される。

内挿をよくするには、 $\tau \sim 400$ に対する \overline{A}_τ が内挿点のメンバーとなるには、
 もっと数値的に正確に評価されなければならない。表 6.14 の値を評価するに
 は、より低い温度に適した \overline{A}_τ と \overline{D}_τ を選ぶことにある。したがって、図 6.11 で
 はサイズ 20×20 に対して表 6.10-b の (a) 欄の帯磁率の値がプロットされた。
 $\tau = 2.0 \sim 0.6$ に対しては、Baker 達の値は、われわれの $N = 10 \times 10$ および
 20×20 に対するものとの中間にくる。 $\tau = 0.5$ より下がると急に減少する。ま
 た Takahashi は最近の論文[43]において、 $N = 10 \times 10$ に対しては、低温にお
 いて彼の結果とわれわれのものとの一致がよいことを示している。しかしながら
 20×20 および 30×30 の系に対してはそれほどよくはなかった。これは一つに
 は 2 次元強磁性体においては、系の有限性に大きく依存することが挙げられる。

第7章 XY 模型への応用

— 一次元環状格子強磁性体の場合 —

7.1 展開係数についての留意点

第4章でXY模型のためのトレースの評価法を詳しく述べ、第5章の第5.3節でこの模型のための内挿法について述べた。この方法では第4章の第4.3節の手続き2がもっとも計算時間を要するし、また展開係数の精度にもっとも影響を与えるものである。ここに与える結果は、内挿公式(5.2.1)で用いる展開係数を評価するのに、サンプル数を $M_s = 100$ (ただし、 $N = 128$ の時の $r = 150$ に対しては $M_s = 50$ を用いた。) に取ったものである。そのデータを表7.1に示す。サンプル数100とは、一見少なすぎるように思えるかもしれないが、第4章で述べた通り、偏りのあるサンプリング法(つまり、 $r/2$ 個のボンドを無作為抽出を行うことで条件1を満たさない大多数の零トレースを与えるサンプルを除外する方法)を採用していることと、(2.2.15)式から分かるように一個のサンプルから 2^r 個のトレース値についての統計量を得ることができることにより、展開係数のトレースへのサンプル一個あたりの寄与の度合いが大きいのでこの程度の M_s でも意義のある結果がえられる。しかしながら、もっと質を向上するには今少しサンプル数を上げたほうがよいかもしれない。ところで $r \sim N$ より大きくなってくると、急に長さの長いクラスターが増え始めてくるので条件2を満たすものが激減してくる。これは、前節で述べたハイゼンベルク模型のときと類似している。異なるのは、XY模型では r が大きくなると少ないサン

ル数でトレースが評価できるということがなくむしろ正反対である。本方法で許されるのは、せいぜい $r \sim N$ あたりまでの展開項の MC 値を得ることである。この理由から表 7.1 に示されている各展開項が選ばれた。

ここで 2 つの数値実験を行ってみた。一つは $N = 32$ の系に対して内挿点を ケース (a) $r = 0, 4, 8, 16, 20, 30$ 、ケース (b) $r = 0, 4, 8, 16, 24, 34$ および ケース (c) $r = 0, 4, 8, 16, 20, 34$ の 3 通りに選び内挿点の取り方によって熱力学的諸量の精度にどのように利いてくるかを調べてみた。もう一つは $N = 128$ の系に対して取り込まれた展開項の項数によって熱力学的諸量がどのように正確に評価できるかということを調べてみた。まず前者についてみてみよう。この 3 ケースにおいて低次の 4 項、つまり $r = 0, 4, 8, 16$ 、は展開係数の MC 値が比較的正確に ($r = 0$ に対しては厳密に) 求められるので共通して用いることにし、 $r > 16$ の残りの 2 内挿点に対して上述の通りに選んだ。このとき第 5 章の第 5.2.2 節で述べた判定法を行ってみると、ケース (a), (b) および (c) に対してそれぞれ $\mu_1 = 1.3055, E/NJ = -0.631$; $\mu_1 = 1.3043, E/NJ = -0.629$ および $\mu_1 = 1.2869, E/NJ = -0.605$ なる結果を得た。ケース (a) および (b) は Katsura [37] による厳密な零点エネルギー値 $-0.6366\dots$ にかなり近い値を与えているが、ケース (c) は両者に比して厳密値との一致がよくない。ケース (c) の内挿点の取り方が悪いのは $r = 34$ に対する展開係数の精度が悪いためであるとは、一概にはいえない。なぜならば、ケース (b) において同一のものをを用いてよい結果を得ているからである。ただケース (b) とケース (c) において異なることは $r = 16$ と 34 の間に 24 か 20 が来ているところだけである。したがって、この 20 が 16 に近すぎることがケース (c) を悪くした原因と解釈できる。このように内挿点の選び方には注意が必要である。内挿点の選び方による熱力学的諸量への効果を示すために、図 7.1 ~ 7.3 を与える。いずれの図においても、

表 7.1 $N = 32$ および 128 スピン系に対して
内挿に用いられた \bar{a}_r および \bar{d}_r 。

$N = 32$

r	N_s	\bar{a}_r	\bar{d}_r
0	exact	$4.2950 \cdot 10^9$	$1.3744 \cdot 10^{11}$
4	100	$3.1996 \cdot 10^{12}$	$8.9906 \cdot 10^{13}$
8	100	$2.4723 \cdot 10^{16}$	$6.1197 \cdot 10^{17}$
16	100	$1.5508 \cdot 10^{25}$	$2.8945 \cdot 10^{26}$
20	100	$7.3513 \cdot 10^{29}$	$1.1734 \cdot 10^{31}$
24	100	$4.3007 \cdot 10^{34}$	$5.8936 \cdot 10^{35}$
30	100	$9.4126 \cdot 10^{41}$	$1.0296 \cdot 10^{43}$
34	100	$7.4743 \cdot 10^{46}$	$6.9256 \cdot 10^{47}$

$N = 128$

r	N_s	\bar{a}_r	\bar{d}_r
0	exact	$3.4028 \cdot 10^{38}$	$4.3556 \cdot 10^{40}$
8	100	$5.7016 \cdot 10^{47}$	$6.8531 \cdot 10^{49}$
16	100	$1.5721 \cdot 10^{59}$	$1.7736 \cdot 10^{61}$
32	100	$1.9583 \cdot 10^{84}$	$1.9480 \cdot 10^{86}$
100	100	$8.5146 \cdot 10^{202}$	$4.8180 \cdot 10^{204}$
150	50	$5.5657 \cdot 10^{294}$	$2.2018 \cdot 10^{296}$

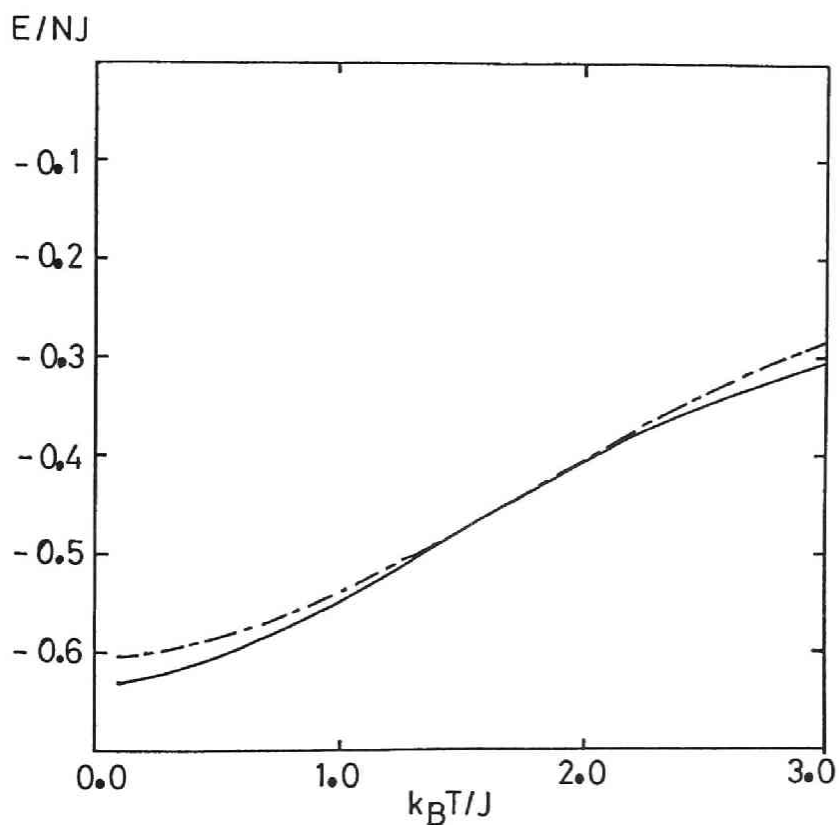


図 7.1 $N = 32$ に対して、(a) $r = 0, 4, 8, 16, 20, 30$; (b) $r = 0, 4, 8, 16, 24, 34$ および (c) $r = 0, 4, 8, 16, 20, 34$ を内挿点として得られた展開係数を用いて得られた内部エネルギーの温度依存性。ただし、(a) は (—)、(b) は (---)、および (c) は (---) で示した。曲線を指定している線種は以下の図においても同様に用いる。このグラフでは一致がよいため (a) と (b) のカーブが重なっている。

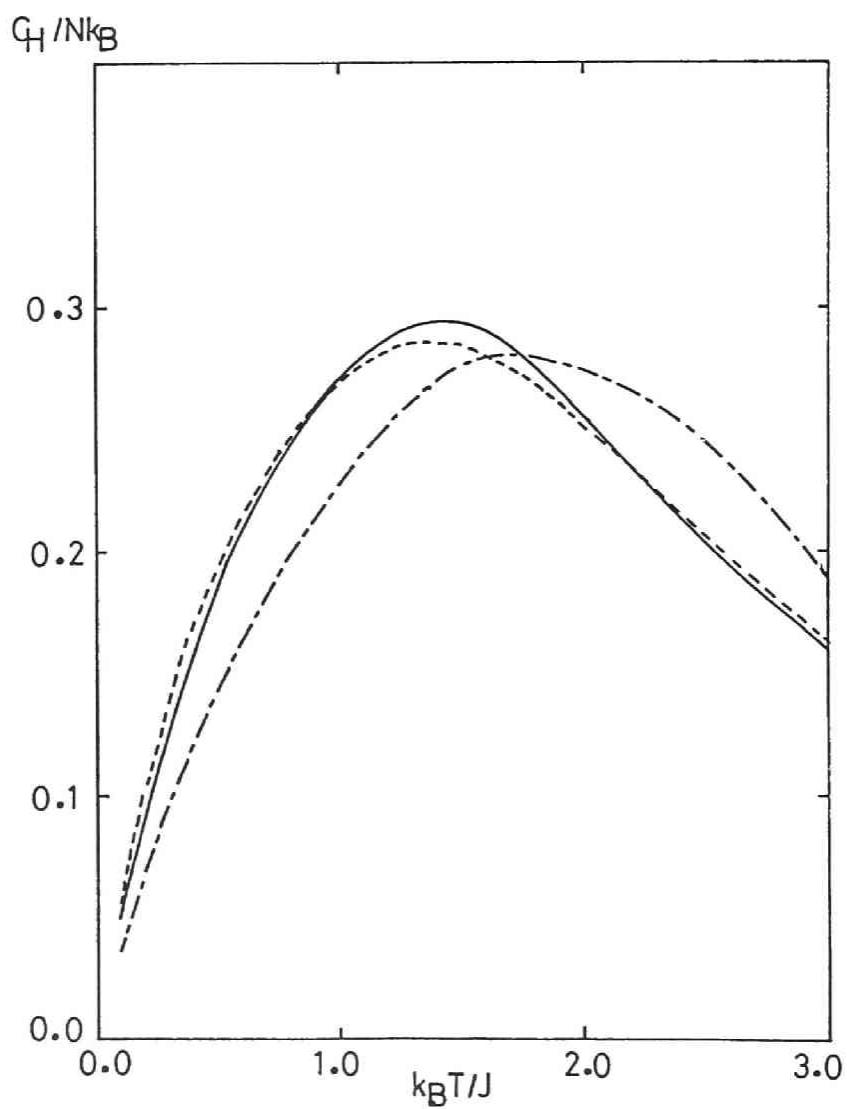


図 7.2 $N = 32$ に対する比熱の温度依存性である以外は図 7.1 に同じ。

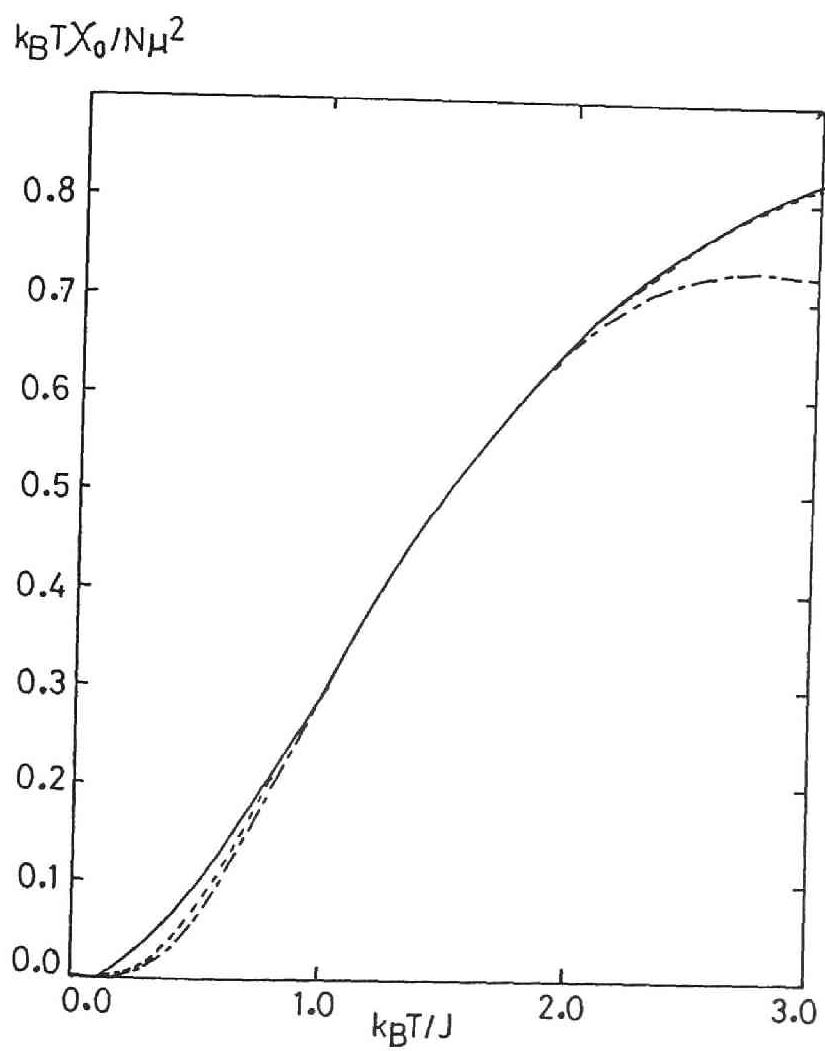


図 7.3 $N = 32$ に対する帯磁率の温度依存性である以外は図 7.1 に同じ。

実線はケース (a)、破線はケース (b) そして一点破線はケース (c) の τ の関数としての熱力学的関数のカーブを表している。ただし、図 7.1 においては、数値的に一致がよい実線と破線がグラフ上では重なっている。いずれのカーブを見てもケース (c) の悪さが如実に現れている。

つぎに、級数展開の打ち切り誤差に関する問題を考えよう。図 7.4 ~ 7.6 に $N = 128$ の系に対してそれぞれ (a) $\tau = 0 \sim 150$ 、(b) $\tau = 0 \sim 500$ 、(c) $\tau = 0 \sim 1,000$ および (d) $\tau = 0 \sim 20,000$ の展開項を取り込んだときの内部エネルギー、比熱および帯磁率を τ の関数としてプロットされている。今の例では、150 項までで打ち切ると $\tau > 1.2$ 、500 項までで打ち切ると $\tau > 0.45$ および 1,000 項までで打ち切ると $\tau > 0.2$ の温度範囲までは有限サイズ効果の範囲内で正確な値を得ることができることがこれらの図から読み取れる。それより低い温度では急に精度が悪くなり項数の不足の影響が顕著になる。2 万項まで取り込むとかなり低温まで正確な値が得られることが分かる。このことは幾 10 万もの展開項を必要とするハイゼンベルク模型に対して適用した方法とは対照的である。

7.2 熱力学的諸量の評価

さて、本方法を用いて $N = 32$ および 128 の系に対してそれぞれ 10,000 項および 20,000 項の展開係数を取り込んで得られた熱力学的諸量の結果を Katsura [37] による厳密値と対比しながら調べてみよう。各図において、破線は $N = 32$ の系、一点破線は $N = 128$ の系における熱力学的関数のカーブであり、実線は Katsura [37] の厳密なカーブを表している。ただし、 $N = 32$ の系に対するデータは前節のケース (a) のものを用い、 $N = 128$ の系に対してはケース (d) のものを用いた。表 7.2 は内部エネルギーの結果を示している。右端の欄は Katsura

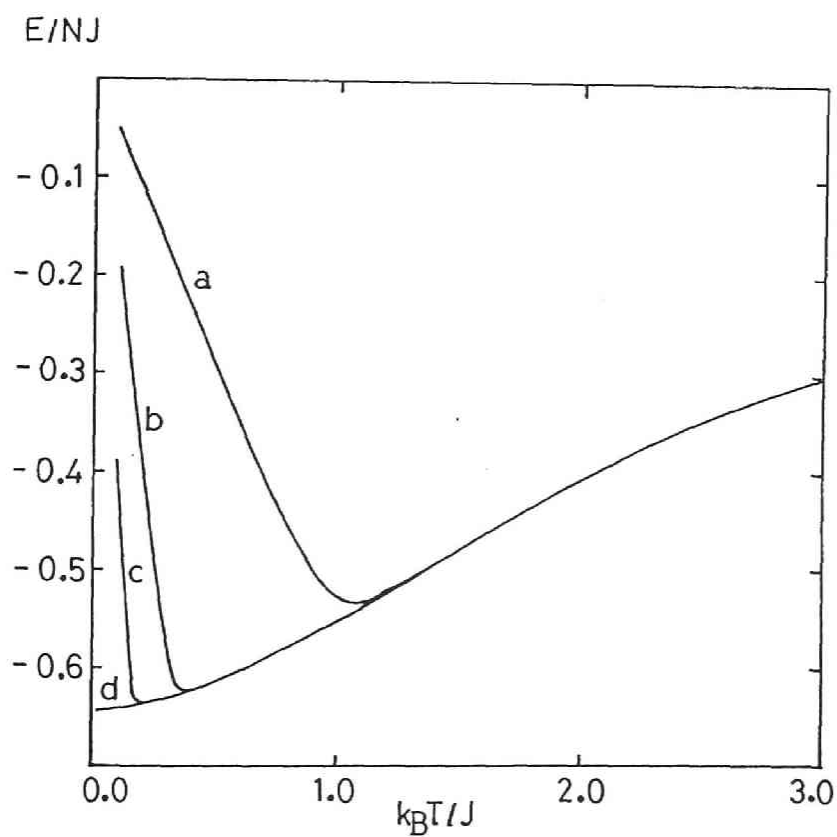


図 7.4 $N = 128$ に対して、(a) 0 ~ 150 (b) 0 ~ 500 (c) 0 ~ 1,000 および (d) 0 ~ 20,000 項までの展開項を取り込んだ時の内部エネルギーの温度依存性。

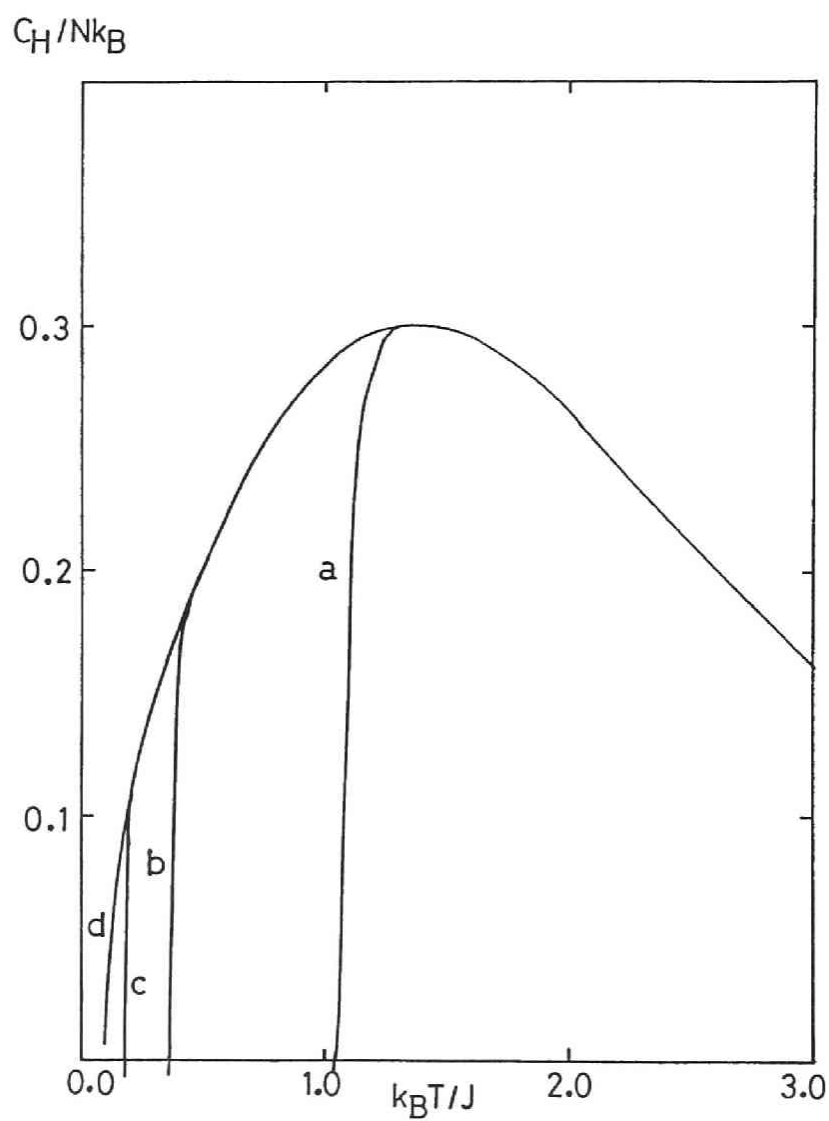


図 7.5 $N = 128$ に対する比熱の温度依存性である以外は図 7.4 に同じ。

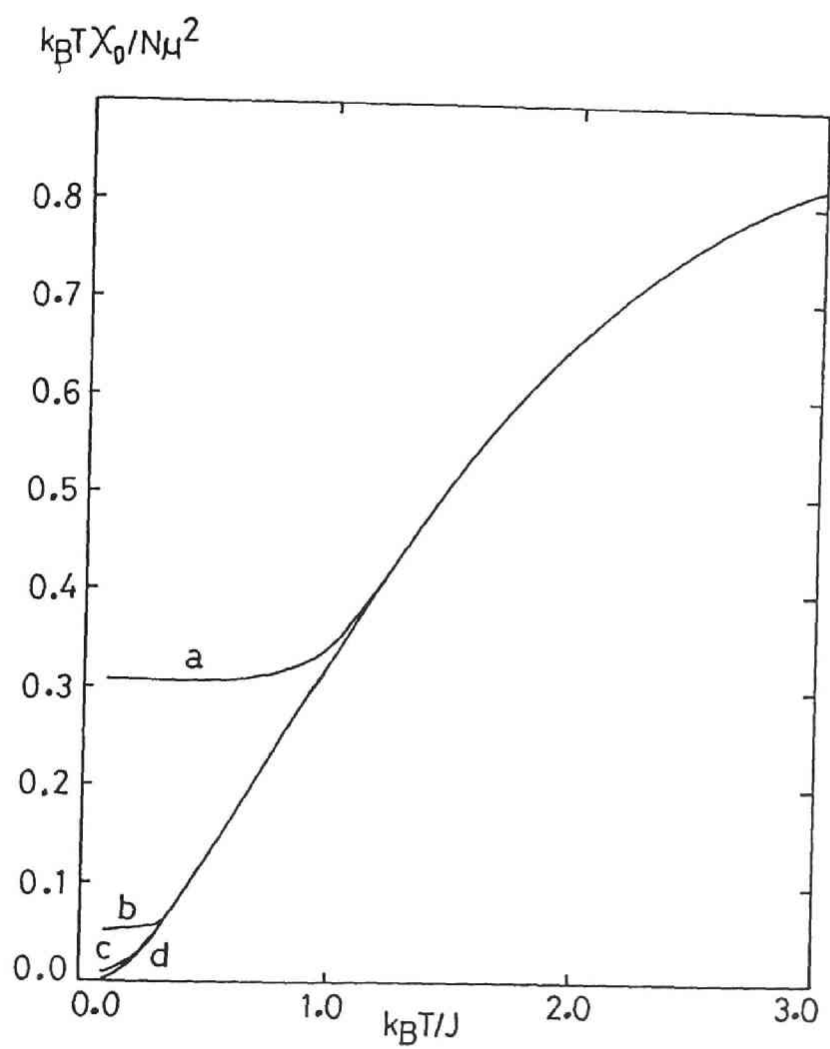


図 7.6 $N = 128$ に対する帯磁率の温度依存性である以外は図 7.4 に同じ。

[37] の (3.2) 式を用いた再計算値である。図 7.7 には τ の関数として内部エネルギーがプロットされている。システム・サイズの依存性を考慮すれば厳密値とかなりよい一致を示していると言える。 $N = 128$ の系において $\tau \leq 0.2$ で零点エネルギー値より低くなっているのは $\tau = 150$ に対する展開係数の MC 値が統計誤差により今少し精度が足りない性と思われる。また、Homma, Matsuda および Ogita 達 [44] の得た $N = 128$ に対する内部エネルギーの値は、 $\tau = 3.0, 2.0, 1.0, 0.8, 0.6, 0.4, 0.2$ および 0.1 に対してそれぞれ $0.301 \pm 0.003, 0.407 \pm 0.003, 0.562 \pm 0.002, 0.589 \pm 0.004, 0.597 \pm 0.002, 0.556 \pm 0.006, 0.508 \pm 0.008$ および 0.509 ± 0.005 であった。そしてまた Chakravarty と Stein [25] による結果は $\tau = 3.0, 2.0, 1.0$ および 0.7 に対してそれぞれ $0.299 \pm 0.002, 0.402 \pm 0.003, 0.558 \pm 0.001$ および 0.590 ± 0.010 であった。いずれも、 $\tau > 0.6$ においては厳密値とよく合っている。Homma 達の結果は $\tau < 0.6$ においては過小評価になっている。しかしながら、彼らの $N = 1024$ の系に対する結果では $\tau \geq 0.2$ の温度範囲で厳密値とよい一致を示している。つぎに、表 7.3 に比熱に対する結果が与えられている。右端の欄は Katsura [37] の (3.3) 式による再計算値である。図 7.8 には τ の関数として比熱がプロットされている。Chakravarty および Stein の得た比熱の値は $\tau = 3.0, 2.0, 1.0$ および 0.7 に対してそれぞれ $0.166 \pm 0.002, 0.265 \pm 0.004, 0.305 \pm 0.028$ および 0.233 ± 0.010 であった。これは厳密値とよい一致を示している。われわれの場合は以前にも述べたとおり、(2.4.3) 式によって評価するので数値的に桁落ちを生じるので精度が極めて悪くなる。しかし定性的には十分よい傾向を示している。最後に、表 7.4 に帯磁率の結果を示す。右端の欄の値は Katsura [37] の (3.6) 式による再計算値である。図 7.9 には τ の関数として帯磁率がプロットしてある。 $\tau \geq 0.2$ において、厳密値と大雑把には一致している。 $N = 128$ の系における帯磁率の値は、

表 7.2 $N = 32$ および 128 に対する内部エネルギー $-E/NJ$ の値.

$k_B T/J$	32	128	<i>Katsura</i>
3.00	$3.03 \cdot 10^{-1}$	$3.00 \cdot 10^{-1}$	$3.01 \cdot 10^{-1}$
2.00	$4.06 \cdot 10^{-1}$	$4.02 \cdot 10^{-1}$	$4.06 \cdot 10^{-1}$
1.00	$5.49 \cdot 10^{-1}$	$5.57 \cdot 10^{-1}$	$5.59 \cdot 10^{-1}$
0.90	$5.62 \cdot 10^{-1}$	$5.73 \cdot 10^{-1}$	$5.74 \cdot 10^{-1}$
0.80	$5.75 \cdot 10^{-1}$	$5.89 \cdot 10^{-1}$	$5.88 \cdot 10^{-1}$
0.70	$5.88 \cdot 10^{-1}$	$6.03 \cdot 10^{-1}$	$6.00 \cdot 10^{-1}$
0.60	$5.98 \cdot 10^{-1}$	$6.17 \cdot 10^{-1}$	$6.10 \cdot 10^{-1}$
0.50	$6.08 \cdot 10^{-1}$	$6.30 \cdot 10^{-1}$	$6.19 \cdot 10^{-1}$
0.40	$6.16 \cdot 10^{-1}$	$6.42 \cdot 10^{-1}$	$6.26 \cdot 10^{-1}$
0.30	$6.24 \cdot 10^{-1}$	$6.52 \cdot 10^{-1}$	$6.31 \cdot 10^{-1}$
0.20	$6.29 \cdot 10^{-1}$	$6.60 \cdot 10^{-1}$	$6.34 \cdot 10^{-1}$
0.10	$6.33 \cdot 10^{-1}$	$6.66 \cdot 10^{-1}$	$6.36 \cdot 10^{-1}$

表 7.3 $N = 32$ および 128 に対する比熱 C_H/Nk_B の値

$k_B T/J$	32	128	<i>Katsura</i>
3.00	$1.61 \cdot 10^{-1}$	$1.57 \cdot 10^{-1}$	$1.63 \cdot 10^{-1}$
2.00	$2.58 \cdot 10^{-1}$	$2.63 \cdot 10^{-1}$	$2.63 \cdot 10^{-1}$
1.00	$2.74 \cdot 10^{-1}$	$3.24 \cdot 10^{-1}$	$3.09 \cdot 10^{-1}$
0.90	$2.62 \cdot 10^{-1}$	$3.17 \cdot 10^{-1}$	$2.91 \cdot 10^{-1}$
0.80	$2.48 \cdot 10^{-1}$	$3.05 \cdot 10^{-1}$	$2.66 \cdot 10^{-1}$
0.70	$2.31 \cdot 10^{-1}$	$2.90 \cdot 10^{-1}$	$2.37 \cdot 10^{-1}$
0.60	$2.11 \cdot 10^{-1}$	$2.70 \cdot 10^{-1}$	$2.06 \cdot 10^{-1}$
0.50	$1.88 \cdot 10^{-1}$	$2.46 \cdot 10^{-1}$	$1.78 \cdot 10^{-1}$
0.40	$1.61 \cdot 10^{-1}$	$2.15 \cdot 10^{-1}$	$1.53 \cdot 10^{-1}$
0.30	$1.31 \cdot 10^{-1}$	$1.78 \cdot 10^{-1}$	$1.22 \cdot 10^{-1}$
0.20	$9.49 \cdot 10^{-2}$	$1.32 \cdot 10^{-1}$	$6.06 \cdot 10^{-2}$
0.10	$5.21 \cdot 10^{-2}$	$7.46 \cdot 10^{-2}$	$2.39 \cdot 10^{-3}$

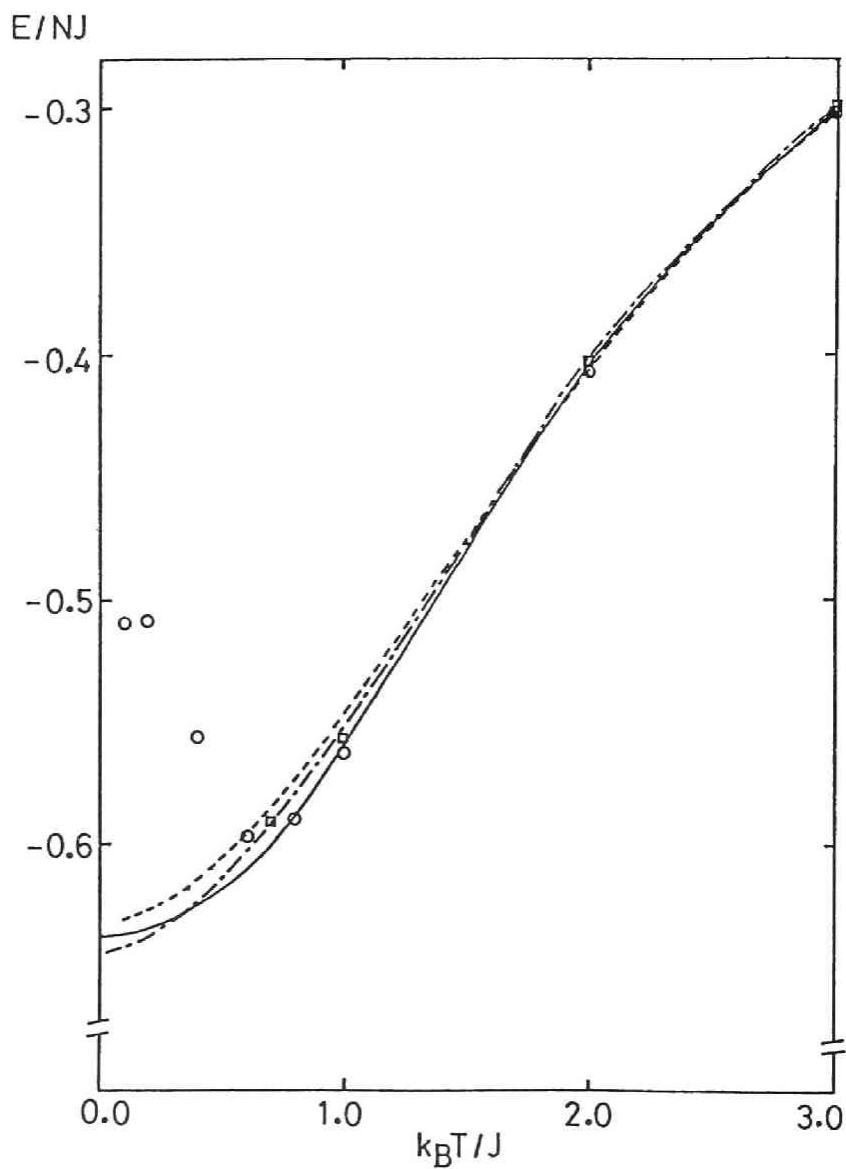


図 7.7 $N = 32$ (---)、 $N = 128$ (-.-) に対する内部エネルギーの温度依存性。Katsura [37] の厳密式によるカーブ (—) も示しておいた。曲線を指定している線種は以下の図においても同様に用いる。Homma 達 [44] の結果 (○) および Chakravarty 達 [25] の結果 (□) もプロットしておいた。

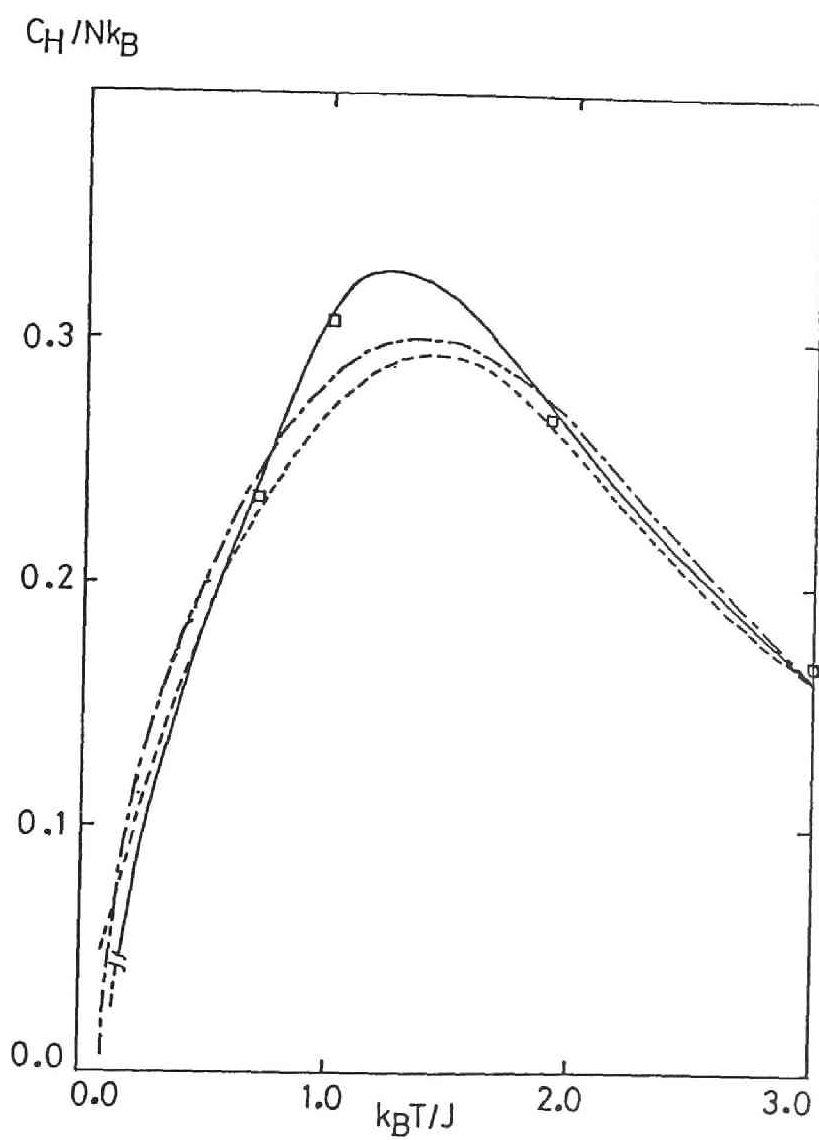


図 7.8 比熱の温度依存性である以外は図 7.7 に同じ。
Chakravarty 達 [25] の結果 (□) もプロットしておいた。

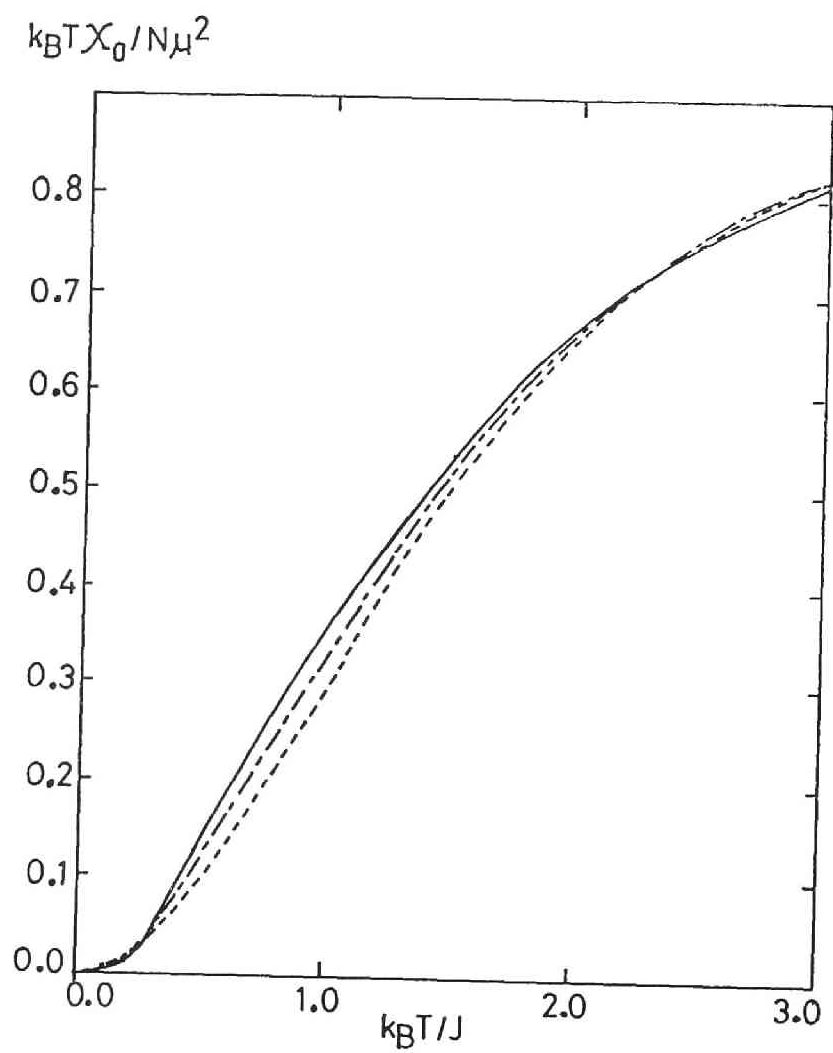


図 7.9 帯磁率の温度依存性である以外は図 7.7 に同じ。

更に低温 $\tau = 0.05, 0.04, 0.03$ においてそれぞれ $1.55 \cdot 10^{-4}$ ($1.05 \cdot 10^{-6}$), $7.77 \cdot 10^{-6}$ ($1.02 \cdot 10^{-8}$), $5.27 \cdot 10^{-8}$ ($4.51 \cdot 10^{-12}$) であった。ただし、括弧内の数値は Katsura [37] による帯磁率の厳密値によるものである。これらの値は τ が下がるにつれて厳密値のオーダーを忠実に追従している。これは有限サイズ効果の現れで、 N を更に大きくとればもっと厳密値に近づく筈である。ハイゼンベルク模型に用いた方法ではこのような温度領域の物理量を調べるには幾十万項もの展開項を要したが、今回は 1 ~ 2 万項でよいようである。第 4 章で紹介したこの方法はハイゼンベルク模型にも適用できるので低温における物理状態を調べるのにこの利点を生かしてみる必要がありそうである。

表 7.4 $N = 32$ および 128 に対する帯磁率 $k_B T \chi_0 / N \mu^2$ の値。

$k_B T / J$	32	128	Katsura
3.00	$8.20 \cdot 10^{-1}$	$8.19 \cdot 10^{-1}$	$8.19 \cdot 10^{-1}$
2.00	$6.57 \cdot 10^{-1}$	$6.63 \cdot 10^{-1}$	$6.69 \cdot 10^{-1}$
1.00	$2.96 \cdot 10^{-1}$	$3.27 \cdot 10^{-1}$	$3.56 \cdot 10^{-1}$
0.90	$2.53 \cdot 10^{-1}$	$2.85 \cdot 10^{-1}$	$3.15 \cdot 10^{-1}$
0.80	$2.11 \cdot 10^{-1}$	$2.41 \cdot 10^{-1}$	$2.74 \cdot 10^{-1}$
0.70	$1.70 \cdot 10^{-1}$	$1.98 \cdot 10^{-1}$	$2.33 \cdot 10^{-1}$
0.60	$1.32 \cdot 10^{-1}$	$1.54 \cdot 10^{-1}$	$1.91 \cdot 10^{-1}$
0.50	$9.72 \cdot 10^{-2}$	$1.12 \cdot 10^{-1}$	$1.46 \cdot 10^{-1}$
0.40	$6.56 \cdot 10^{-2}$	$7.18 \cdot 10^{-2}$	$9.87 \cdot 10^{-2}$
0.30	$3.82 \cdot 10^{-2}$	$3.63 \cdot 10^{-2}$	$4.95 \cdot 10^{-2}$
0.20	$1.58 \cdot 10^{-2}$	$1.03 \cdot 10^{-2}$	$1.13 \cdot 10^{-2}$
0.10	$1.82 \cdot 10^{-3}$	$3.02 \cdot 10^{-4}$	$1.11 \cdot 10^{-4}$

第8章 まとめ と 今後の指針

この 10 年来モンテカルロ法を用いた量子スピン系をシミュレートする多くの研究がなされてきている。自由度が大きく、非可換な演算子をもつ量子系において、モンテカルロ法は強力な手段である。特にわが国の研究者によって、量子スピン系のための代表的なアプローチが開発されてきた。その一つに Suzuki [45] による、Trotter 公式[46]を一般化して d 次元量子系を $d+1$ 次元古典系に変換する方法がある。そしてまた、Homma, Matsuda および Ogita 達 [47] による、Metropolis 達 [28] の方法の直接的な拡張とみられる Decoupled Cell Method がある。量子スピン系のモンテカルロ法には大別して 2 つのカテゴリーがある。一つは量子系を古典系の問題に変換して扱うやり方であり、上述の 2 方法がそうである。もう一つは、Handscomb [20] が提案した高温展開法に基づきそのまま量子系として扱うやり方である。本方法は、後者に属するが、Metropolis の方法は用いていない点で、全く新しいアプローチである。従来から、高温展開法は厳密解について正確に熱力学的諸量、転移温度および critical exponent などを与えてくれることが知られている。しかしながら 20 次を超える高次の展開係数を求めることは困難であるし、また不可能でもある。ところが温度が下がれば下がるほどより多くの展開係数を取り込まなければ正確な物理量を与えてくれない。したがって高温展開法の数値的に正確な値を与えてくれる長所を生かし、しかもかなり低温領域においも適用できる方法としては、この高次の展開係数を直接評価することに尽きる。そこで展開係数の厳密値を求めることは無理として、それ

をモンテカルロ法によって評価することにした。この考えは、第6章および第7章の数値例からも見ても正当なものである。これも、ただ展開係数をモンテカルロ法で評価できただけでは実現しない。なぜなら、幾10万もの展開係数をすべて直接に求めることなど不可能である。ところが、第5章で詳説した強力な有理関数型内挿公式の導入により僅か10個にも満たない内挿データとしての展開係数のみを評価することにより上述の幾10万もの展開係数を一気に求めることができるようになった。

ハイゼンベルク模型における展開係数のモンテカルロ・サンプリングについてまとめてみると、展開項 r が $r=0$ および $r=1$ に対しては展開係数の厳密な値が得られるし、内挿データとして一番高次の項 r_M は厳密値 $A_\infty = N+1$ に近い値を与える展開係数 \bar{A}_{r_M} を選べばよかった。残りの内挿データの選び方には任意性があるが、特に $r \sim N$ のあたりの展開係数を内挿データとして取り込むときには注意深くしなければならない。このことは、第6章の第6.2.1項で述べたように長短織り混ぜたさまざまなサイクルを含んでいるためトレース値 $2^{k(C_r)}$ に大きなバラツキが生じて統計誤差が大きくなる性である。幸いにも、展開係数の精度がそれほどよくなくても熱力学的諸量の精度にはあまり敏感には利いてこないという好都合な事実がある。このことが本方法を有用なものにしている主たる理由である。

一方XY模型における展開係数のモンテカルロ・サンプリングについては、まず $r=0$ に対する厳密な展開係数値は必ず内挿点に加えることとし、残りの5内挿点は r が N よりあまり大きくならない範囲で選ぶことにした。なぜならば、 $r > N$ に対する展開項の評価には法外なサンプル数が要求されてしまうからである。しかし、このような内挿点では $r > 1.0$ の温度範囲における熱力学的諸量しか正確な値が得られないことが数値結果から分かった。そこで内挿公式

をそのまま外挿式として用いることにした。この妥当性は Katsuda [32] の判定法により η が十分大きな項に対する展開係数の値に対しては言える。内挿点の中で一番大きな η に対する展開項からこの展開係数の極限值までの中間の値の外挿値の精度についてはいろいろなスピン・サイズの系に対して注意深く調べる必要があり目下進行中である[51]。この方法では、第4章の第4.2節で述べた非零トレース率の算定がコンピュータにおいて最も計算時間を要するものである。 $N = 32$ および 128 の系に対しては、併せて $120 \sim 130$ 種類程度の独立したクラスタに対して上述のトレース率を算定すればすべての内挿点用の展開係数のMC値が評価できた。

つぎに、熱力学的諸量についてまとめてみよう。まず、ハイゼンベルク模型の一次元系についてであるが、数値計算としては厳密である $N = 10$ に対する Bonner と Fisher [33] の結果と比較し、帯磁率指数を含めたあらゆる量において十分な一致をみることができ本方法の有用性が確認できた。ところが有限系しか扱えないので更に幾通りかの系について調べる必要があるので、 $N = 10, 20, 30$ および 128 の系についても調べてみた。その結果 $N = 128$ の系に対して温度 $\tau = 0.2$ を境として高温側では高温展開法による Baker 達 [34] の値と、また低温側ではスピン波理論に基づく Takahashi [36] の値と第6章の第6.1節で示したとおりよい一致を示した。このことは、本方法がかなり広範囲の温度領域において有効であることを示すものである。二次元系においても第6.2節で示された通り一応満足のいく結果はえられているが、二次元強磁性系は、一次元系以上に系の有限性が利いてくるようである [43] ので更に大きな系を扱う必要があるが、安定した数値解を得るのにも先に述べた $\eta \sim N$ あたりの展開係数の精度よい評価が不可欠のようである。また系において零点エントロピーや零点エネルギーの厳密値は分かっているので低温部での収束性をチェックすることができ

る。一次元XY強磁性系では、Katsura [37] の厳密解が存在するので比較してみた。第7章で示したように $\tau > 0.5$ における熱力学的諸量は概ね一致していると言える。更に精度を増すことは今後に残された問題である。

さて、今後の課題について考えてみよう。今回はスピン $1/2$ のハイゼンベルク模型とXY模型に対して分配関数を直接評価する方法について詳説したが、恐らくイジング模型にも容易に適用できるものと思われる。そこで、Onsager [48] によって厳密解の与えられている二次元正方格子に対して本方法を適用したい。相転移を生じしかも厳密解の存在するこの模型と対比することにより、転移温度および critical exponent の推定法や有限サイズ効果の取扱い方など本方法のよりの確な利用法を確立したい。その上で二次元正方格子ハイゼンベルク強磁性体に適用して、Takahashi [43] によって指摘されたサイズ効果を確認しながら Stanley と Kaplan [49] の予想した転移の存否を再度確認したい。勿論、第4章で述べた方法を更に正方格子におけるXY模型に拡張し、古典系では生じるKosterlitz および Thouless [50] によって示された相転移が量子系においては存在するのか調べるための数値実験を行いたい。その他反強磁性体の系にも適用できるように改良することも計画している。また、スピン $1/2$ 以外の系にも適用できるように改良したい。とにかく、本方法の更に確実な利用法を確立するとともに、それを用いて臨界現象と相転移に対して更に有意義な研究を進めていきたい。

謝辞

本研究は、京都大学工学部数理工学教室 上田順教授の指導の下でなされた。先生から御指導を受けるようになったのは昭和59年5月からであります。当時、私は量子スピン系のモンテカルロ法に関心を持っていたのですがなかなか成果を挙げるまでには至りませんでした。昭和60年4月から一年間、京都大学工学部の私学研修員として数理工学教室の上田研究室で直接に御指導を受けることができる好機を授かりました。この時期にハイゼンベルク模型のための本方法を提案することができました。これも先生の懇切丁寧な御指導によるものであり心より感謝致しております。以来今日まで変わらぬ御指導を戴いていることも併せて深謝致します。

また、上田先生に私を紹介して戴きました岡山理科大学理学部 松原武生教授（当時、京都大学理学部教授）に感謝致します。同じく岡山理科大学工学部 今枝国之助教授にも御高配にあずかりましたことを深謝致します。

本方法をXY模型に対して実用化する上で重要な改良（第4.2節および第5.2.2項参照）をされた勝田敏彦氏（現、朝日新聞社勤務）に感謝致します。本論文をまとめるにあたって、この改良点については氏の修士論文を活用させて戴きました。

また岡山理科大学理学部応用数学教室におきましては、私の研究活動を円滑にするために常に御配慮と励ましを戴きました一村稔教授に感謝致します。

最後に、本研究に際し御協力戴いた関係各位に感謝の意を表します。

参考文献

- [1] H.A. Kramers: *Commun. Kamerlingh Onnes Lab, Leiden Suppl.* **83**, 1 (1936).
- [2] W. Opechowski, *Physica*: **4**, 181 (1937).
- [3] V. Zehler: *Z. Naturf.* **5A**, 344 (1950).
- [4] H.A. Brown and J.M. Luttinger: *Phys. Rev.* **100**, 685 (1955).
H.A. Brown: *Phys. Rev.* **104**, 624 (1956).
- [5] G.S. Rushbrooke and P.J. Wood: *Proc. Phys. Soc., Lond. A* **68**, 1161 (1955).
- [6] C. Domb and M.F. Sykes: *Proc. Phys. Soc., Lond. B*, **69**, 486 (1956).
- [7] G.S. Rushbrooke, G.A. Baker, Jr. and P.J. Wood: *Phase Transition and Critical Phenomena* vol.3 ed. Domb and Green (Academic Press, London, 1974),
245-356.
- [8] R. Brout: *Phys. Rev.* **115**, 824 (1959).
- [9] G.S. Rushbrooke: *J. Math. Phys.* **5**, 1106 (1964).
- [10] C. Domb: *Advan. Phys.* **9**, Nos. 34 and 35 (1960).
- [11] G.S. Rushbrooke and P.J. Wood: *Mol. Phys.* **1**, 257 (1958).
高温展開法にふれた日本語のテキストとしては以下のものが挙げられる。
- [12] 金森順次郎：磁性（培風館）1969.
- [13] 小口武彦：磁性体の統計理論（裳華房）1971.
- [14] 芳田 奎：磁性 I（朝倉書店）1972.
- [15] G.A. Baker Jr.: *Phys. Rev.* **124**, 768 (1961).
- [16] 桂重俊：日本物理学会誌 第40巻 第11号 (1985).
- [17] D.D. Betts: C.J. Elliott and R.V. Ditzian: *Can. J. Phys.* **49**, 1327 (1971).

-
- [18] D.D. Betts: *Phase Transition and Critical Phenomena* vol.3 ed. Domb and Green (Academic Press, London, 1974), 569-652.
- [19] 高温級数展開法を用いた研究結果については文献 7 および 10 の Reference を参照して下さい。
- [20] D.C. Handscomb: *Proc. Camb. Phil. Soc.* **58**, 594 (1962); *ibid* **40**, 115 (1964).
- [21] J.W. Lyklema: *Phys. Rev. Lett.* **49**, 88 (1982).
- [22] J.W. Lyklema: *Monte Carlo Methods in Quantum Problems* ed. M.H. Kalos (D. Reidel Pub. Co., Dordrecht, Boston, Lancaster, 1984) 145-155.
- [23] W.K. Hastings: *Biometrika*, **57**, 97 (1970).
- [24] J.W. Lyklema: *Phys. Rev.* **27**, 3108 (1983).
- [25] S. Chakravarty and D.B. Stein: *Phys. Lett.* **49**, 582 (1982).
- [26] D.H. Lee, J.D. Joannopolos and J.W. Negele: *Phys. Rev.* **B30**, 1599 (1984).
- [27] E. Manousakis and R. Salvador: *Phys. Rev. Lett.* **60**, 840 (1988).
- [28] N.M. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Teller and E.: *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
- [29] S. Kadowaki and A. Ueda: *Prog. Theor. Phys.* **75**, 451 (1986).
- [30] S. Kadowaki and A. Ueda: *Prog. Theor. Phys.* **78**, 224 (1987).
- [31] S. Kadowaki and A. Ueda: *Prog. Theor. Phys.* **82**, 493 (1989).
- [32] K. Katsuda: Master's thesis, Department of Applied Mathematics and Physics, Faculty of Engineering, Kyoto University, (1989).
- [33] J.C. Bonner and M.E. Fisher: *Phys. Rev.* **A135**, 640 (1964).
- [34] G.A. Baker Jr., G.S. Rushbrooke and H.E. Gilbert: *Phys. Rev.* **A135**, 1272 (1964).
- [35] G.A. Baker Jr., H.E. Gilbert, J. Eve and G.S. Rushbrooke: *Phys. Lett.* **14**, 207 (1967).
- [36] M. Takahashi: *Prog. Theor. Phys. Suppl.* No.87, 233 (1986).

- [37] S. Katsura: Phys. Rev. **127**, 1508 (1962).
- [38] P.A.M. Dirac: *The Principles of Quantum Mechanics* 4th ed.
(Clarendon, Oxford, 1958), p.222.
- [39] M. Hamermesh: *Group Theory and Its Application to Physical Problem*
(Addison-Wesley, 1964).
- J. Riordon: *An Introduction to Combinatorial Analysis* (John Wiley, Canada,
1958), p.66.
- [40] D.E. Knuth: *The Art of Computer Programming*, Vol. 1
(Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1972), p.169.
- [41] S. Kadowaki and A. Ueda: Mem. Fac. Eng., Kyoto Univ. **53**, No.1, 1 (1991).
- [42] O. Portilho: Comp. Phys. Communi. **59**, 345 (1990).
- [43] M. Takahashi: Prog. Theor. Phys. **83**, No.5, 815 (1990).
- [44] S. Homma, H. Matsuda and N. Ogita: Prog. Theor. Phys. **75**, 1058 (1986)
- [45] M. Suzuki: Comm. Math. Phys. **51**, 183 (1976); Prog. Theor. Phys.
56, 1454 (1976); M. Suzuki, S. Miyashita and A. Kuroda: Prog. Theor. Phys.
58, 1377 (1977).
- [46] H. F. Trotter: Proc. Am. Math. Soc. **10**, 545 (1959).
- [47] S. Homma, H. Matsuda and N. Ogita: Prog. Theor. Phys. **72**, 1245 (1984).
- [48] L. Onsager: Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [49] H.E. Stanley and T.A. Kaplan: Phys. Rev. Lett. **17**, 913 (1966).
- [50] J.M. Kosterlitz and D.J. Thouless: J. Phys. **C6**, 1181 (1973).
- [51] K. Katsuda, S. Kadowaki and A. Ueda: (準備中) .

付録

プログラムリスト2

```
C *****
  SUBROUTINE HENORM(AM,AE)
C *****
```

An unnormalized data is normalized in the form of $AM \cdot 10^{AE}$.
As an example, $123.45 \cdot 10^{12345} \rightarrow 0.12345 \cdot 10^{12348}$.

```
INTEGER AE
REAL*8 AM,LOGAM,TE
REAL*8 ZERO,ONE,TEN
PARAMETER (ZERO=0.0,ONE=1.0, TEN=10.0)

IF (AM.EQ.ZERO) THEN
  AE=0
ELSE
  LOGAM=LOG10(ABS(AM))
  AE=AE+INT(LOGAM)
  LOGAM=LOGAM-INT(LOGAM)
  IF (LOGAM.GE.0) THEN
    LOGAM=LOGAM-1
    E=AE+1
  ENDIF
  AM=SIGN(ONE,AM)*TEN**LOGAM
ENDIF

END
```

```

C *****
  SUBROUTINE HEADD(AM,AE,BM,BE,CM,CE)
C *****

 $CM \cdot 10^{CE} \leftarrow (AM \cdot 10^{AE}) + (BM \cdot 10^{BE}).$ 

  INTEGER AE,BE,CE,SHIFT,TMPE
  REAL*8 AM,BM,CM,TMP1,TMP2
  REAL*8 ZERO,TEN
  PARAMETER (ZERO=0.0,TEN=10.0)

  SHIFT = ABS(AE-BE)
  TMP1 = AM
  TMP2 = BM
  IF (SHIFT .GT. 16) THEN
    IF (AE .LE. BE) THEN
      TMP1 = ZERO
    ELSE
      TMP2 = ZERO
    ENDIF
    GOTO 30
  ENDIF
  IF (AE .GT. BE) THEN
    DO 10 I=1,SHIFT
      TMP2 = TMP2/TEN
10  CONTINUE
    ELSE
      DO 20 I=1,SHIFT
      TMP1 = TMP1/TEN
20  CONTINUE
    ENDIF
30  CM = TMP1 + TMP2
    CE = AE
    IF (AE .LT. BE) CE = BE
    CALL HENORM(CM,CE)

  END

```



```

C *****
  SUBROUTINE HESUB(AM,AE,BM,BE,CM,CE)
C *****

 $CM \cdot 10^{CE} \leftarrow (AM \cdot 10^{AE}) - (BM \cdot 10^{BE}).$ 

  INTEGER AE,BE,CE,SHIFT,TMPE
  REAL*8 AM,BM,CM,TMP1,TMP2
  REAL*8 ZERO,TEN
  PARAMETER (ZERO=0.0,TEN=10.0)

  SHIFT = ABS(AE-BE)
  TMP1 = AM
  TMP2 = -BM
  IF (SHIFT .GT. 16) THEN
    IF (AE .LE. BE) THEN
      TMP1 = ZERO
    ELSE
      TMP2 = ZERO
    ENDIF
    GOTO 30
  ENDIF
  IF (AE .GT. BE) THEN
    DO 10 I=1,SHIFT
      TMP2 = TMP2/TEN
10  CONTINUE
    ELSE
      DO 20 I=1,SHIFT
        TMP1 = TMP1/TEN
20  CONTINUE
      ENDIF
30  CM = TMP1 + TMP2
    CE = AE
    IF (AE .LT. BE) CE = BE
    CALL HENORM(CM,CE)

  END

```

```

C *****
  SUBROUTINE HEMUL(AM,AE,BM,BE,CM,CE)
C *****

 $CM \cdot 10^{CE} \leftarrow (AM \cdot 10^{AE}) \times (BM \cdot 10^{BE}).$ 

  INTEGER AE,BE,CE
  REAL*8 AM,BM,CM,TMP1,TMP2

  TMP1 = AM
  TMP2 = BM
  CM = TMP1*TMP2
  CE = AE + BE
  CALL HENORM(CM,CE)

  END

C *****
  SUBROUTINE HEDIV(AM,AE,BM,BE,CM,CE)
C *****

 $CM \cdot 10^{CE} \leftarrow (AM \cdot 10^{AE}) / (BM \cdot 10^{BE}).$ 

  INTEGER AE,BE,CE
  REAL*8 AM,BM,CM,TMP1,TMP2

  TMP1 = AM
  TMP2 = BM
  CM = TMP1/TMP2
  CE = AE - BE
  CALL HENORM(CM,CE)

  END

```

```

C *****
      SUBROUTINE HELOG(AM,AE,BM,BE)
C *****

       $BM \cdot 10^{BE} \leftarrow \ln(AM \cdot 10^{AE})$ 

      INTEGER AE,BE
      REAL*8 AM,BM,TEN
      PARAMETER (TEN=10.0)

      BM = AM
      BE = AE
      BM = LOG(BM) + REAL(BE)*LOG(TEN)
      BE = 0
      CALL HENORM(BM,BE)

      END

C *****
      SUBROUTINE HELG10(AM,AE,BM,BE)
C *****

       $BM \cdot 10^{BE} \leftarrow \log_{10}(AM \cdot 10^{AE})$ 

      INTEGER AE,BE
      REAL*8 AM,BM

      BM = AM
      BE = AE
      BM = LOG10(BM) + REAL(BE)
      BE = 0
      CALL HENORM(BM,BE)

      END

```

```

C *****
  SUBROUTINE HEEX10(AM,AE,BM,BE)
C *****

 $BM \cdot 10^{BE} \leftarrow 10^{AM \cdot 10^{AE}}$ 

  INTEGER AE,BE
  REAL*8 AM,BM,TEN,TEMP
  PARAMETER (TEN=10.0)

  BM = AM
  BE = AE
  TEMP = BM*TEN**REAL(BE)
  BE = INT(TEMP)
  BM = TEN**(TEMP - REAL(BE))
  CALL HENORM(BM,BE)

  END

C *****
  INTEGER FUNCTION HEEQ(AM,AE,BM,BE)
C *****

 $AM \cdot 10^{AE} = BM \cdot 10^{BE} ?$ 

  INTEGER AE,BE
  REAL*8 AM,BM

  HEEQ = 1
  IF ((AM.EQ.BM) .AND. (AE.EQ.BE)) HEEQ = 0

  END

C *****
  INTEGER FUNCTION HELT(AM,AE,BM,BE)
C *****

 $AM \cdot 10^{AE} < BM \cdot 10^{BE} ?$ 

  INTEGER AE,BE,CE
  REAL*8 AM,BM,CM

```

```

HELT = 1
CALL HESUB(AM,AE,BM,BE,CM,CE)
IF (CM.LT.0.0) HELT=0

```

```

END

```

```

C *****
C      INTEGER FUNCTION HEGT(AM,AE,BM,BE)
C *****

```

$$AM \cdot 10^{AE} > BM \cdot 10^{BE} \quad ?$$

```

INTEGER AE,BE,CE
REAL*8 AM,BM,CM

```

```

HEGT = 1
CALL HESUB(AM,AE,BM,BE,CM,CE)
IF (CM.GT.0.0) HEGT=0

```

```

END

```

論文リスト

K. Fujii, S. Kadowaki and I. Mannari

A Green's Function Theory of the Heisenberg Paramagnet

Prog. Theor. Phys. Vol.50, No.5, (1973) 74-81.

K. Fujii, I. Mannari and S. Kadowaki

A Green's Function Approach to the Heisenberg Model of One-, Two- and Three-Dimensional Systems

Prog. Theor. Phys. Vol.50, No.5, (1973) 1501-1509.

* S. Kadowaki and A. Ueda

A Direct Evaluation Method of the Partition Function of Quantum Spin Systems

Prog. Theor. Phys. Vol.75, No.2, (1986) 451-454.

* S. Kadowaki and A. Ueda

A New Monte Carlo Approach to Quantum Spin Systems

— Direct Evaluation of the Partition Function —

Prog. Theor. Phys. Vol.78, No.2, (1987) 224-236.

* S. Kadowaki and A. Ueda

A New Monte Carlo Approach to Quantum Spin Systems II

— Two Dimensional Systems —

Prog. Theor. Phys. Vol.82, No.3, (1989) 493-506.

* S. Kadowaki and A. Ueda

A New Monte Carlo Method for Quantum Spin Systems

— Technical Details of the Method —

Mem. Fac. Eng., Kyoto Univ. Vol.53, No.1, (1991) 1.

* T. Katsuda, S. Kadowaki and A. Ueda

A New Monte Carlo Method for XY-model Quantum Spin Systems.

(仮称) (準備中)

以上の論文の中 * 印を付したものをまとめて本論文と致しました。

